VOORTGEZETTE KLASSIEKE MECHANICA

door

B.R.A. Nijboer

Najaar 1974



Klassieke mechanica

Inleiding

Leerboeken: H. Goldstein, Classical Mechanics, Addison-Wesley, Cambridge, Mass., 1950.
H.C. Corben and P. Stehle, Classical Mechanics, John Wiley, New York 1950.
A. Sommerfeld, Vorlesungen über theoretische Physik Bd I, Akad.Verl., Leipzig 1964.

De klassieke mechanica, zoals hier behandeld, beoogt een voortzetting en aanvulling te bieden van de voorkandidaatscolleges klassieke mechanica. De onderwerpen die ter sprake zullen komen zijn: principe van d'Alembert, de vergelijkingen van Lagrange, het principe van Hamilton, de vergelijkingen van Hamilton, de theorie van kleine trillingen en de viriaalstelling.

Om te beginnen herinner ik nog even aan de wetten van Newton (1686), die het uitgangspunt vormen van de klassieke mechanica. Deze grondwetten berusten uiteraard op ervaringsfeiten, al is het niet eenvoudig concrete experimenten aan te geven, waarop ze gebaseerd zijn. Ook hier is het feitelijk weer de goede overeenstemming van de gevolgtrekkingen met de ervaring, die een rechtvaardiging vormt. In zijn Foundations of Physics waarschuwt Frank vooral tegen de mening, dat de wetten van Newton min of meer vanzelfsprekend zouden zijn. Hij zegt, hoe meer men ze als evident beschouwt, des te minder heeft men ze begrepen. Dat de grondwetten niet zo voor de hand liggen, als het nu wel eens ons voorkomt, blijkt ook duidelijk uit de historische ontwikkeling van de mechanica van Aristoteles tot Newton (vgl. hiervoor het boek "Val en Worp" van Dr. E.J. Dijksterhuis). Aristoteles beschouwde de vrije val als de natuurlijke beweging, alle andere bewegingen noemde hij gedwongen. Voor Galilei meende men ook veelal, dat voor het onderhouden van een constante snelheid al een oorzaak (kracht) nodig was, niet alleen voor het geven van een versnelling.

Newton's grondstellingen worden ook niet meer critiekloos aanvaard. Men denke bv. aan de relativiteitstheorie van Einstein, waarin de begrippen absolute ruimte en tijd van Newton verdwenen zijn. We zullen ons verder beperken tot enkele opmerkingen over de wetten afzonderlijk.

1. De traagheidswet (feitelijk reeds afkomstig van Galilei).

Formuleren we deze als volgt:

> Een massapunt (onder een stoffelijk of massapunt verstaan we een geometrisch punt met massa), waarop geen uitwendige invloeden werkzaam zijn, blijft in rust of in eenparige rechtlijnige beweging,

dan zegt deze al heel weinig, omdat er altijd wel een coördinatenstelsel is aan te wijzen t.o. waarvan het massapunt in rust is of eenparig beweegt. Een betere formulering is al:

> Als voor een bepaald massapunt, dat niet onderworpen is aan uitwendige invloeden, geldt dat het t.o.v. een bepaald coördinatenstelsel in rust of in eenparige beweging is, dan zal elk ander massapunt, dat vrij is van dergelijke invloeden (d.w.z. dat ver genoeg van andere massapunten verwijderd is) zich t.o.v. ditzelfde systeem eenparig rechtlijnig voortbewegen of in rust bevinden.

Eigenlijk postuleren we dus dat een dergelijk stelsel bestaat. Zo'n coördinatensysteem heet een inertiaalstelsel. Het is duidelijk, dat ieder stelsel dat t.o.v. een inertiaalstelsel eenparig rechtlijnig voortbeweegt zelf ook een inertiaalstelsel is. Belangrijk is, dat we voor vele doeleinden een vast met de aarde verbonden stelsel als inertiaalstelsel kunnen beschouwen. Niet altijd is dit juist, zoals bv. blijkt uit de slingerproef van Foucault. Een betere keuze is dan een stelsel met de oorsprong in de zon en waarvan de assen vaste richtingen hebben t.o.v. de sterren.

In onze formulering dreigt verder nog gevaar, dat het traagheidsbeginsel tot een tautologie wordt, als we nl. van "vrij van uitwendige

invloeden" eerst zullen spreken als het beschouwde massapunt eenparig beweegt of in rust is. Iets dergelijks kan optreden bij tijdmetingen: zouden we een tijdinterval definiëren als evenredig met de hoek waarover de aarde gedurende dat tijdinterval draait, dan wordt de bewering dat de aarde eenparig om zijn as wentelt tot een tautologie en wordt de discussie over de afwijking van de aardrotatie van een eenparige rotatie paradoxaal. Dit laatste probleem wordt slechts zinvol omdat men later de tijdmeting anders is gaan definiëren.

2. Voor een verandering van de snelheid t.o.v. een inertiaalsysteem is een oorzaak nodig, die we kracht noemen; de samenhang tussen kracht en versnelling zal zijn:

$$\vec{K} = m\,\vec{a} \qquad \left(\text{of beter } = \frac{d(m\,\vec{v})}{dt}\right)$$

waarin de evenredigheidsconstante m de trage massa voorstelt. Hier hebben we de moeilijkheid dat $\vec{K}$ noch m nauwkeurig gedefinieerd is. Newton definieerde m als volume maal dichtheid, maar dit leidt kennelijk tot een vicieuze cirkel, immers de dichtheid is weer massa gedeeld door volume. Men zou bv. krachten onafhankelijk met behulp van uitrekkingen aan veren kunnen definiëren. Het blijkt dan, dat we krachten als vectoren kunnen samenstellen (parallelogram van krachten). Een kracht is een vector, die dezelfde richting heeft als de door hem veroorzaakte versnelling. Verder blijkt dan voor elk lichaam de verhouding van kracht en versnelling een voor dat lichaam karakteristieke constante te zijn, de zg. trage massa, die bij homogene substanties evenredig is met het volume. De eenheid van massa is de kilogram. De kracht die hieraan een versnelling geeft van 1 m/sec^2 heet de Newton (= 10^5 dyne).

Uit nauwkeurige metingen is gebleken dat op een bepaalde plaats op aarde lichamen met dezelfde trage massa door de aarde even sterk worden

aangetrokken of algemener, dat het gewicht van een lichaam (d.i. de aantrekkingskracht door de aarde er op uitgeoefend) evenredig is met zijn trage massa. Voor elke plaats op aarde is er dus een karakteristieke constante, de versnelling van de zwaartekracht ter plaatse. Men drukt dit soms uit door te zeggen: zware massa = trage massa. Einstein heeft als eerste op de merkwaardigheid van dit feit gewezen. De zwaartekracht is de enige kracht, die evenredig is met de massa van het lichaam waarop hij werkt (de electrische kracht bv. is er geheel onafhankelijk van). Het gevolg is dat we niet kunnen uitmaken of we in een zwaarteveld zitten of wel in een stelsel dat een zekere versnelling t.o.v. een inertiaalstelsel heeft. Dit zgn. aequivalentieprincipe is het uitgangspunt geworden voor de algemene relativiteitstheorie.

3. Als derde wet van Newton beschouwt men gewoonlijk de wet: actie = reactie. D.w.z. de krachten die twee massapunten (bv. tengevolge van hun gravitatie of van hun electrische ladingen) op elkaar uitoefenen, zijn gelijk en tegengesteld, dus $\vec{K}_1 + \vec{K}_2 = 0$. Het is daarbij niet noodzakelijk, dat deze krachten langs de verbindingslijn der massapunten gericht zijn. (Bv. de krachten die bewegende ladingen op elkaar uitoefenen.) Ook deze wet moet gezien worden als ervaringsfeit.

We gaan nu verder uit van de geldigheid, t.o.v. een inertiaalstelsel, van de wet $\vec{K} = m\ddot{\vec{r}}$, waarbij we in vrijwel alle gevallen, tenzij uitdrukkelijk vermeld een aan de aarde vast verbonden stelsel als zo'n inertiaalstelsel zullen beschouwen.

Als nu de krachten als functies van de coördinaten en de tijd (eventueel ook van de snelheden) gegeven zijn - de krachten aan andere gebieden der fysica ontleend - vinden we de beweging door de 3 differen-

tiaalvergelijkingen van de 2^e orde

$$m\ddot{x}(t) = K_x(x,y,z,t)$$
$$m\ddot{y}(t) = K_y(x,y,z,t)$$
$$m\ddot{z}(t) = K_z(x,y,z,t)$$

te integreren. De oplossing is volkomen bepaald als op een gegeven tijdstip t_o plaats en snelheid bekend zijn.

We moeten wel bedenken dat de 2^e wet van Newton zonder meer slechts geldt voór een inertiaalstelsel. Voor een stelsel $S_1(x_1,y_1,z_1)$ dat eenparig beweegt t.o.v. een inertiaalstelsel $S(x,y,z)$ is

$$\vec{a}_1 = \vec{a}$$

zodat weer geldt $\vec{K} = m\vec{a}_1$. Ook S_1 is immers een inertiaalstelsel. Beweegt S_1 eenparig versneld met versnelling $\vec{a}_o$ t.o.v. S, dan is

$$\vec{a}_1 = \vec{a} - \vec{a}_o$$
$$m\vec{a}_1 = m\vec{a} - m\vec{a}_o = \vec{K} - m\vec{a}_o .$$

Willen we nu ook in zo'n stelsel S_1 de wet van Newton blijven toepassen, dan moeten we aan de kracht $\vec{K}$ nog een fictieve- of schijnkracht ($= - m\vec{a}_o$) toevoegen.

Ook in een stelsel, dat eenparig roteert t.o.v. een inertiaalstelsel kunnen we de wet van Newton blijven toepassen, mits we schijnkrachten invoeren.

Over de dynamica van één massapunt zullen we verder niet spreken. Wel nog in het kort iets over de dynamica van een stelsel vrije massapunten. We onderscheiden de massapunten door een index υ. Dan geldt:

$$m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon = \vec{K}_\upsilon = \vec{K}^u_\upsilon + \vec{K}^i_\upsilon ,$$

dwz. we onderscheiden de kracht $\vec{K}_\upsilon$ op het υ-de massapunt in een uitwendig deel $\vec{K}^u_\upsilon$, afkomstig van bv. uitwendige krachtvelden, en een inwendig

deel $\vec{K}^i_\nu$ afkomstig van de andere massapunten.

$$\vec{K}^i_\nu = \sum_{\mu \neq \nu} \vec{K}^i_{\nu\mu}$$

waarin $\vec{K}^i_{\nu\mu}$ de kracht is door μ uitgeoefend op ν.

Als $\vec{K}^u_\nu = 0$ voor alle ν spreken we van een afgesloten systeem.

We nemen aan dat voor de inwendige krachten de wet aktie = reaktie zal gelden:

$$\vec{K}^i_{\mu\nu} = -\vec{K}^i_{\nu\mu}$$

en bovendien dat deze krachten langs de verbindingslijn ν — μ gericht zijn.

We definieren vervolgens het zwaartepunt van het stelsel:

$$\vec{R} = \frac{\sum_\nu m_\nu \vec{r}_\nu}{M} \quad \text{met} \quad M = \sum_\nu m_\nu$$

Uit de bewegingsvgl. volgt door sommatie:

$$\sum_\nu m_\nu \ddot{\vec{r}}_\nu = \sum_\nu \vec{K}^u_\nu + \sum_\nu \vec{K}^i_\nu \ .$$

Maar

$$\sum_\nu \vec{K}^i_\nu = \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq \mu}} \sum_\mu \vec{K}^i_{\nu\mu} = 0, \quad \text{zodat}$$

$$M \ddot{\vec{R}} = \sum_\nu \vec{K}^u_\nu \ .$$

Dit is de zg. zwaartepuntsstelling: Het zwaartepunt van een stelsel massapunten beweegt zo, alsof alle massa daar geconcentreerd was en alle uitwendige krachten daar aangrepen. (Merk op: als $\vec{K}^u_\nu$ afhangt van de

coördinaten $\vec{r}_\upsilon$ moet men oppassen met deze stelling!).

De totale <u>impuls</u>

$$\vec{P} = \sum_\upsilon \vec{p}_\upsilon = \sum_\upsilon m_\upsilon \dot{\vec{r}}_\upsilon = M\dot{\vec{R}}.$$

Verder zien we dat:

$$\dot{\vec{P}} = M\ddot{\vec{R}} = \sum_\upsilon \vec{K}^u_\upsilon \qquad \text{(\underline{impulswet})}.$$

Voor een afgesloten systeem is derhalve: $\vec{P}$ = constant, dus $\vec{R} = \vec{a}\,t + \vec{b}$, waarin $\vec{a}$ en $\vec{b}$ willekeurige integratieconstanten.

Kijken we ook nog even naar het <u>impulsmoment</u>.

Het totale impulsmoment is gedefinieerd als

$$\vec{L} = \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \wedge \vec{p}_\upsilon .$$

Differentiatie geeft:

$$\dot{\vec{L}} = \sum_\upsilon \dot{\vec{r}}_\upsilon \wedge \vec{p}_\upsilon + \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \wedge \dot{\vec{p}}_\upsilon = \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \wedge \dot{\vec{p}}_\upsilon =$$

$$= \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \wedge \vec{K}^u_\upsilon + \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \wedge \vec{K}^i_\upsilon .$$

Laat zien dat op grond van onze onderstelling omtrent de inwendige krachten de laatste term nul is. Dus:

$$\dot{\vec{L}} = \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \wedge \vec{K}^u_\upsilon \qquad \text{(\underline{impulsmomentwet})}.$$

Voor een afgesloten systeem is derhalve het totale impulsmoment constant.

Als we invoeren de coördinaten t.o.v. het zwaartepunt

$$\vec{r}\,'_\upsilon = \vec{r}_\upsilon - \vec{R}, \quad \text{zodat} \quad \sum_\upsilon m_\upsilon \vec{r}\,'_\upsilon = 0$$

en dus

$$m_\upsilon \dot{\vec{r}}'_\upsilon = \vec{p}'_\upsilon = \vec{p}_\upsilon - m_\upsilon \dot{\vec{R}}, \text{ zodat } \sum_\upsilon \vec{p}'_\upsilon = \sum_\upsilon \vec{p}_\upsilon - M\dot{\vec{R}} = 0,$$

dan definiëren we het impulsmoment t.o.v. het zwaartepunt

$$\vec{L}' = \sum_\upsilon \vec{r}'_\upsilon \wedge \vec{p}'_\upsilon .$$

Bewijs nu zelf:

$$\vec{L} = \vec{L}' + \vec{R} \wedge \vec{P} ,$$

in woorden: het totale impulsmoment om de oorsprong 0 is gelijk aan het totale impulsmoment om het zwaartepunt + het impulsmoment van de totale, in het zwaartepunt geconcentreerd gedachte massa, om 0.

Door naar t te differentiëren, vindt men (verifieer dit)

$$\dot{\vec{L}}' = \sum_\upsilon \vec{r}'_\upsilon \wedge \vec{K}^u_\upsilon .$$

De impulsmomentstelling geldt dus ook t.o.v. het zwaartepunt, hoewel het coördinatenstelsel dat met het zwaartepunt meebeweegt geen inertiaalstelsel hoeft te zijn!

Hoofdstuk I: Het principe van d'Alembert en de vergelijkingen van Lagrange.

1. Het principe van d'Alembert.

We bekijken weer een systeem van n massapunten, coördinaten $\vec{r}_\upsilon$, waarbij we nu toelaten dat de coördinaten niet onafhankelijk zijn. We nemen nl. aan dat er p ($p < 3n$) betrekkingen zijn tussen de coördinaten, die verder ook nog wel van de tijd mogen afhangen:

$$F_j(x_1,y_1,z_1,\dots x_n,y_n,z_n, t) = 0 . \qquad j = 1\dots p \qquad (1)$$

Voorbeelden: Een massapunt beweegt over een gegeven oppervlak (dat zelf ook nog wel mag bewegen), een slinger, 2 massapunten die een vaste onderlinge afstand hebben (halter).

Men spreekt in dit geval van een holonoom systeem (rheonoom als de F's van t afhangen, skleronoom als dit niet het geval is). Voor zulke systemen geldt dat het aantal vrijheidsgraden (d.i. het aantal coördinaten dat gegeven moet zijn om de configuratie vast te leggen) gelijk is aan het aantal coördinaten dat onafhankelijk gevarieerd kan worden. In ons geval is dit 3n - p.

Bv. een bol op een volkomen glad plat vlak heeft 5 vrijheidsgraden (2 om het middelpunt vast te leggen, 2 hoeken om het raakpunt op de bol vast te leggen en 1 voor de rotatie om de verbindingslijn van middelpunt en raakpunt) en men kan deze 5 parameters onafhankelijk variëren. Het is een holonoom systeem.

Bij een bol op een volkomen ruw plat vlak, waarover hij alleen maar kan rollen is het aantal vrijheidsgraden nog 5, maar deze kunnen niet onafhankelijk gevarieerd worden. Onder de beperkende voorwaarden zijn er nl. niet-integreerbare betrekkingen tussen de differentialen van de parameters. Dit is een voorbeeld van een niet-holonoom systeem. Daar zullen we ons verder niet mee bezighouden.

Fysisch gesproken worden de beperkende voorwaarden (constraints) gerealiseerd door reactiekrachten, die we in het algemeen niet kennen. Bv. de normale druk van een oppervlak, de spanning in het koord van een slinger etc. Soms interesseert men zich alleen voor de beweging, soms ook voor de reactiekrachten.

Bekijken we weer de wet van Newton:

$$m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon = \vec{K}_\upsilon + \vec{K}'_\upsilon \qquad (2)$$

waarbij $\vec{K}_\upsilon$ de bekende (in- of uitwendige) krachten voorstellen en $\vec{K}'_\upsilon$ de onbekende reactiekrachten.

(1) en (2) geven ons 3n + p vergelijkingen, terwijl we 6n onbekenden hebben ($\vec{r}_\upsilon$ en $\vec{K}'_\upsilon$) . Deze kunnen we niet oplossen. Het principe van d'Alembert zal blijken de ontbrekende informatie te leveren.

Het luidt: Bij een kleine virtuele verplaatsing verrichten de reactiekrachten tezamen geen arbeid.

Een virtuele verplaatsing $\delta\vec{r}_\upsilon$ is een oneindig kleine verplaatsing op een vast tijdstip waarbij aan de voorwaarden (1) voldaan blijft.

Er is geen algemeen geldend bewijs voor de juistheid van het principe van d'Alembert, men moet het opvatten als een onafhankelijk postulaat, dat door de resultaten gerechtvaardigd wordt. In een aantal concrete gevallen kan men de juistheid er van inzien: Hebben we bv. een bol op een glad plat vlak. De reactiekracht staat dan loodrecht op het vlak en verricht inderdaad geen arbeid bij een virtuele verplaatsing waarbij de bol op het vlak blijft. Verder: Stel we hebben 2 massapunten op vaste onderlinge afstand (halter). De reactiekrachten zijn hier langs de verbindingslijn gericht en gelijk en tegengesteld:

$$\vec{K}_1' = - \vec{K}_2' .$$

De door deze krachten verrichte virtuele arbeid is $\vec{K}_1^1 \cdot (\delta\vec{r}_1 - \delta\vec{r}_2)$ en dit is evenredig met $(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{1}{2}\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 = 0.$ Ook bij de slinger is direct in te zien dat de reactiekracht bij virtuele verplaatsing geen arbeid verricht.

Het principe van d'Alembert luidt nu in formule:

$$\sum_\upsilon \vec{K}'_\upsilon \cdot \delta\vec{r}_\upsilon = 0 \qquad (3)$$

of

$$\sum_{\upsilon} \left(m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon - \vec{K}_\upsilon \right) \cdot \delta\vec{r}_\upsilon = 0 \qquad (4)$$

waarbij de $\delta\vec{r}_\upsilon$'s niet onafhankelijk zijn vanwege de beperkende voorwaarden. Merk op dat in (4) geen reactiekrachten meer optreden. Sommerfeld geeft een aantal voorbeelden waarbij toepassing van (4) reeds leidt tot een oplossing van het probleem.

In de statica is $\ddot{\vec{r}}_\upsilon = 0$ en dus $\sum_{\upsilon} \vec{K}_\upsilon \cdot \delta\vec{r}_\upsilon = 0.$

Dit is het zg. principe van Bernoulli: In evenwicht verrichten de bekende gegeven krachten geen arbeid bij een virtuele verplaatsing. Als de krachten afgeleid kunnen worden van een potentiaal

$$\vec{K}_\upsilon = - \frac{\partial V(r_1 \ldots r_n)}{\partial \vec{r}_\upsilon} \qquad (5)$$

dan wordt het principe van Bernoulli:

$$\sum_{\upsilon=1}^{n} \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_\upsilon = \delta V = 0 \,. \qquad (6)$$

Voor statisch evenwicht heeft dus de totale potentiële energie een extreme waarde.

2. De vergelijkingen van Lagrange van de 1^e soort (1760)

Waren alle $\delta\vec{r}_\upsilon$ in (4) onafhankelijk dan zouden we uit (4) kunnen besluiten tot

$$m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon = \vec{K}_\upsilon \,,$$

hetgeen niet juist is als er reactiekrachten zijn. We hebben echter nog nevencondities waaraan de virtuele verplaatsingen $\delta\vec{r}_\upsilon$ moeten voldoen, ze zijn dus niet onafhankelijk. We maken nu gebruik van de

multiplicatoren methode van Lagrange,

Uit (1) ($F_j = 0$) volgt:

$$\delta F_j = \sum_{\upsilon} \text{grad}_{\upsilon} F_j \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon} = \sum_{\upsilon} \left(\frac{\partial F_j}{\partial x_{\upsilon}} \delta x_{\upsilon} + \frac{\partial F_j}{\partial y_{\upsilon}} + \frac{\partial F_j}{\partial z_{\upsilon}} \delta z_{\upsilon} \right) = 0 . \quad (7)$$

Deze vergelijking vermenigvuldigen we met een voorlopig onbekende multiplicator λ_j en we tellen dan de ontstane betrekkingen op bij (4).

$$\sum_{\upsilon=1}^{n} \left(m_{\upsilon} \ddot{\vec{r}}_{\upsilon} - \vec{K}_{\upsilon} + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \,\text{grad}_{\upsilon} F_j \right) \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon} = 0 . \quad (8)$$

Er zijn 3n - p van de $\delta\vec{r}_{\upsilon}$'s onafhankelijk. We kiezen nu de λ_j's zodanig, dat p van de uitdrukkingen

$$m_{\upsilon} \ddot{\vec{r}}_{\upsilon} - \vec{K}_{\upsilon} + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \,\text{grad}_{\upsilon} F_j = 0 \quad (9)$$

worden. Uit (8) volgt dan dat ook de resterende 3n - p uitdrukkingen (9) nul moeten zijn omdat de bijbehorende (3n - p) $\delta\vec{r}_{\upsilon}$'s wel onafhankelijk zijn. Zo hebben we 3n vgl. (9) gekregen die de Lagrange vgl. van de 1^e soort heten. Samen met $F_j = 0$ hebben we nu 3n + p betrekkingen tussen 3n + p onbekenden ($\vec{r}_{\upsilon}$ en λ_j).

We zien dat de reactiekrachten juist gegeven worden door

$$\vec{K}'_{\upsilon} = - \sum_{j} \lambda_j \,\text{grad}_{\upsilon} F_j \quad (10)$$

3n grootheden $\vec{K}'_{\upsilon}$ uitgedrukt in p λ_j's. Het zullen in het algemeen functies van de tijd worden.

Toepassing: Stel er is een virtuele verplaatsing mogelijk (met inachtneming van de bijvoorwaarden) waarbij alle punten dezelfde translatie ondergaan. Dus $\delta\vec{r}_\upsilon = \delta\vec{r}$.

Dus $\sum_{\upsilon=1}^{n} \left(m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon - \vec{K}_\upsilon\right) . \delta r = 0$ voor iedere $\delta\vec{r}$.

Dan is

$$\sum_{\upsilon=1}^{n} \left(m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon - \vec{K}_\upsilon\right) = 0$$

$$\dot{\vec{P}} = \sum_{\upsilon=1}^{n} \vec{K}_\upsilon .$$

Is de resultante van de bekende in- en uitwendige krachten nul, dan geldt dus $\vec{P}$ = constant.

3. De vergelijkingen van Lagrange van de 2^e soort.

In de fysica zijn deze vergelijkingen, waaruit de reactiekrachten verdwenen zijn, belangrijker. Interesseert men zich voor die reactiekrachten (spanningen) dan moet men dus teruggrijpen naar de Lagrange-vergelijkingen van de 1^e soort.

We hebben weer 3n coördinaten en p betrekkingen. We voeren nu in 3n - p zg. gegeneraliseerde coördinaten $q_k (k = 1,\dots 3n-p)$, waartussen geen betrekkingen meer bestaan en die de configuratie vastleggen. Dus evenveel gegeneraliseerde coördinaten als het systeem vrijheidsgraden heeft. Bij een vast lichaam bv. de 3 rechthoekige coördinaten van het zwaartepunt en 3 hoeken van Euler.

$\dot{q}_k$ heet gegeneraliseerde snelheid. De oorspronkelijke coördinaten x_υ, y_υ, z_υ zijn functies van q_k en eventueel van t. Dit laatste is bv. het geval als de betrekkingen de tijd bevatten, maar ook als er geen

betrekkingen zijn en als we bv. de gegeneraliseerde coördinaten nemen t.o.v. een roterend assenkruis. De relaties $F_j = 0$ zijn identiek vervuld in de gegeneraliseerde coördinaten

$$F_j \left\{ x_1(q_k,t),\ y_1(q_k,t), \ldots z_n(q_k,t),\ t \right\} \equiv 0 \qquad (11)$$

en dus

$$\frac{\partial F_j}{\partial q_\ell} = \sum_{\upsilon=1}^{n} \left(\mathrm{grad}_\upsilon\, F_j \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} \right) = 0 \,. \qquad (12)$$

We vermenigvuldigen nu de vgl. van Lagrange van de 1e soort:

$$m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon - \vec{K}_\upsilon + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j\, \mathrm{grad}_\upsilon\, F_j = 0$$

scalair met $\frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell}$ en tellen ze op (sommeren over υ).

Op grond van (12) vallen dan de λ's weg en we hebben

$$\sum_{\upsilon=1}^{n} \left(m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} - \vec{K}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} \right) = 0 \qquad (13)$$

voor $\ell = 1,2,\ldots .3n - p \equiv m$.

Als nu $\quad \vec{r}_\upsilon = \vec{r}_\upsilon\,(q,\ldots .q_m,t)$

dan is

$$\dot{\vec{r}}_\upsilon = \sum_{\ell=1}^{m} \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell}\, \dot{q}_\ell + \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial t} \qquad (14)$$

een lineaire functie van de $\dot{q}_k$'s.

Hieruit volgt:

$$\left(\frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_\ell} \right)_{q_k} = \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} \,. \qquad (15)$$

Dan is:

$$\ddot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} = \ddot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_\ell} = \frac{d}{dt}\left(\dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_\ell}\right) - \dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_\ell}\right)$$

$$= \frac{d}{dt}\left(\dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_\ell}\right) - \dot{\vec{r}}_\upsilon \; \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell}\right) . \qquad (16)$$

Verder:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell}\right) = \frac{\partial^2 \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell \partial t} + \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial^2 \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell \partial q_k} \dot{q}_k$$

$$= \frac{\partial}{\partial q_\ell}\left(\frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial t} + \sum_{k=1}^{m} \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_k} \dot{q}_k\right) = \frac{\partial}{\partial q_\ell} \dot{\vec{r}}_\upsilon \qquad (17)$$

(17) in (16) ingevuld geeft:

$$\ddot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} = \frac{d}{dt}\left(\dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_\ell}\right) - \dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial}{\partial q_\ell} \dot{\vec{r}}_\upsilon . \qquad (18)$$

(13) wordt nu:

$$\sum_{\upsilon=1}^{n} m_\upsilon \frac{d}{dt}\left(\dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_\ell}\right) - \sum_{\upsilon=1} m_\upsilon \dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial q_\ell} = \sum_{\upsilon=1} \vec{K}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} . \qquad (19)$$

Nu is de kinetische energie $T = \sum_{\upsilon=1}^{n} \frac{1}{2} m_\upsilon \dot{\vec{r}}_\upsilon^{\,2}$. Daardoor wordt (19)

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\ell}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\ell} = \sum_{\upsilon=1}^{n} \vec{K}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} . \qquad (20)$$

Opmerking: omdat $\dot{\vec{r}}_\upsilon$ een lineaire functie is van de $\dot{q}_k$'s wordt T een kwadratische functie van de $\dot{q}_k$'s en wel als $\vec{r}_\upsilon(q_k, t)$ niet expliciet van t afhangt een homogeen kwadratische.

We schrijven nu het R.L. van (20) een beetje anders. De arbeid bij de virtuele verplaatsing $\delta\vec{r}_\upsilon$ is

$$\delta A = \sum_{\upsilon=1}^{n} \vec{K}_\upsilon \cdot \delta\vec{r}_\upsilon = \sum_{\upsilon=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{m} \left(\vec{K}_\upsilon \cdot \frac{\partial\vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell}\right) \delta q_\ell = \sum_{\ell=1}^{m} Q_\ell \, \delta q_\ell$$

waarbij we

$$Q_\ell = \sum_{\upsilon=1}^{n} \vec{K}_\upsilon \cdot \frac{\partial\vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} \tag{21}$$

de gegeneraliseerde kracht noemen.

Opmerking: Vergelijking van (14) en (21) (als we afzien van $\frac{\partial\vec{r}_\upsilon}{\partial t}$) leert dat de transformaties van snelheden en krachten in de gegeneraliseerde snelheden en krachten samenhangen. Zij heten wel contragredient (= gespiegeld invers).

(20) wordt nu:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_k} = Q_k \tag{22}$$

de vergelijkingen van Lagrange van de 2^e soort.

Uit deze 3n - p gewone differentiaalvergelijkingen van de 2^e orde, die we afgeleid hebben voor holonome systemen waarvoor d'Alembert geldt kunnen we in principe de $q_k(t)$ oplossen. Men kan (22) ook direct uit d'Alembert afleiden zonder via die van de 1^e soort te gaan (vgl.Goldstein).

Stel nu de krachten hebben een potentiaal, die nog wel van t mag afhangen

$$\vec{K}_\upsilon = - \mathrm{grad}_\upsilon \, V'(x_1, \ldots z_n, t) .$$

We kunnen de potentiaal ook in de q_k's uitdrukken $(V(q_k, t)$.

Dan is:

$$Q_k = \sum_{\upsilon=1}^{n} \vec{K}_\upsilon \cdot \frac{\partial\vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} = - \sum \mathrm{grad}_\upsilon \, V' \cdot \frac{\partial\vec{r}_\upsilon}{\partial q_\ell} = - \frac{\partial V}{\partial q_k} . \tag{23}$$

Voeren we nu in $L = T - V = L(q_k, \dot{q}_k, t)$ de <u>functie van Lagrange</u>.

Dan kunnen we schrijven (daar V niet van $\dot{q}_k$ afhangt)

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 . \tag{24}$$

De oplossingen zijn bepaald door de beginwaarden van q_k en $\dot{q}_k$.

De voorwaarden waaronder we de vorm (24) van de vgl. van Lagrange van de 2^e soort hebben afgeleid zijn:

a) het systeem is holonoom

b) het principe van d'Alembert geldt

c) er is een potentiaal waarin de $\dot{q}_k$ niet expliciet voorkomen.

We definiëren nu de <u>gegeneraliseerde impulsen</u>:

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} . \tag{25}$$

Hiervoor geldt:

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \sum_{\upsilon=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon} \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_k} = (\text{volgens } 15) = \sum_{\upsilon=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon} \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_k} \tag{26}$$

$$= \sum_{\upsilon=1}^{m} m_\upsilon \dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_k} .$$

We zien (vgl. 21) dat de krachten en de impulsen cogredient transformeren.

<u>Toepassingen:</u>

1° Een vrij deeltje in een conservatief krachtveld. Hier kan men bv. als gegeneraliseerde coördinaten de gewone rechthoekige coördinaten nemen. Dan is $p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$, de gewone impuls.

$$L = \tfrac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2) - V(x,y,z) .$$

De vgl. (24) worden hier: $m\ddot{x} + \frac{\partial V}{\partial x} = 0$ enz. dwz. de gewone vgl. van Newton.

2° Neem in het platte vlak een vrij deeltje in een conservatief krachtveld. Als gegeneraliseerde coördinaten nemen we vlakke poolcoördinaten r en φ.

$$L = \tfrac{1}{2}m(v_r^2 + v_\varphi^2) = \tfrac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) \qquad p_r = m\dot{r} \qquad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi} = mrv_\varphi$$

= impulsmoment.

De Lagrangevergelijkingen worden:

$$m(\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2) + \frac{\partial V}{\partial r} = 0$$

$$m\frac{d}{dt}(r^2\dot{\varphi}) + \frac{\partial V}{\partial \varphi} = 0 .$$

Wat zijn de gegeneraliseerde krachten in dit geval?

$$Q_k = -\frac{\partial V}{\partial q_k} = \vec{K} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_k} = K_x \frac{\partial x}{\partial q_k} + K_y \cdot \frac{\partial y}{\partial q_k}$$

$$x = r\cos\varphi \qquad y = r\sin\varphi$$

$$Q_r = -\frac{\partial V}{\partial r} = K_r$$

$$Q_\varphi = -\frac{\partial V}{\partial \varphi} = r\,K_\varphi$$

waarin K_r en K_φ de componenten van de kracht in de r en de φ richting voorstellen. Q_φ is dus eigenlijk het moment van de kracht om de oorsprong. Onze Lagrangevgl. zijn equivalent met de vroeger afgeleide bewegingsvgl. in poolcoördinaten. Als $V = V(r)$ (centraal krachtveld) is $r^2\dot{\varphi}$ = constant, dwz. het impulsmoment $mr^2\dot{\varphi}$ = constant.

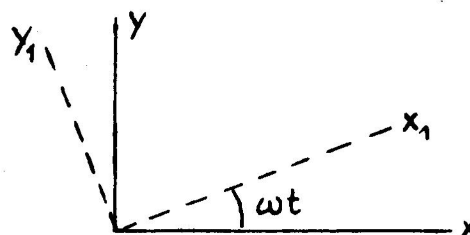
3° Leidt zelf de bewegingsvgl. af voor één massapunt in 3 dimensies in poolcoördinaten.

4° Leidt zelf de bewegingsvgl. af voor 2 massapunten door een starre verbindingsstang zonder gewicht ter lengte ℓ verbonden. Voer in de coördinaten van het zwaartepunt en de hoeken θ,φ die de orientatie van de stang bepalen.

$$T = \tfrac{1}{2} M\left(\dot{X}^2 + \dot{Y}^2 + \dot{Z}^2\right) + \tfrac{1}{2} I\left(\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta\, \dot{\phi}^2\right)$$

$$M = m_1 + m_2 \qquad I = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\, \ell^2 .$$

5° Roterend assenkruis



We nemen de rechthoekige coördinaten $x_1 y_1$ in het eenparig roterende assenkruis als gegeneraliseerde coördinaten.

$x = x_1 \cos\omega t - y_1 \sin\omega t$ De transformatieformules hangen hier

$y = x_1 \sin\omega t + y_1 \cos\omega t$ expliciet van de tijd af.

$$T = \tfrac{1}{2} m(\dot{x}^2+\dot{y}^2) = \tfrac{1}{2} m(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + 2\omega x_1 \dot{y}_1 - 2\omega y_1 \dot{x}_1 + \omega^2 x_1^2 + \omega^2 y_1^2)$$

$$p_{x_1} = \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_1} = m(\dot{x}_1 - \omega y_1) \qquad p_{y_1} = \frac{\partial T}{\partial \dot{y}_1} = m(\dot{y}_1 + \omega x_1).$$

De Lagrangevergelijkingen luiden:

$$m\ddot{x}_1 - 2m\omega\dot{y}_1 - m\omega^2 x_1 = -\frac{\partial V}{\partial x_1}$$

$$m\ddot{y}_1 + 2m\omega\dot{x}_1 - m\omega^2 y_1 = -\frac{\partial V}{\partial y_1} .$$

Hier komen de Corioliskracht en de centrifugale kracht te voorschijn praktisch zonder rekenwerk.

4. De energieintegraal en de hamiltonfunctie; cyclische coördinaten.

Uit de vgl. van Lagrange van de 2e soort volgt:

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L\right) = -\frac{\partial L}{\partial t} . \qquad (27)$$

Immers het linker lid luidt uitgeschreven:

$$\sum_k \ddot{q}_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} + \sum_k \dot{q}_k \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) - \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \ddot{q}_k - \sum_k \frac{\partial L}{\partial q_k} \dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial t} .$$

Op grond van de vgl. van Lagrange wordt dit $- \frac{\partial L}{\partial t}$.

Als nu L niet expliciet van t afhangt (als bv. T noch V expliciet van t afhangen) dan vinden we:

$$\sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L = \sum_k p_k \dot{q}_k - L = \tilde{H}(q_k,\dot{q}_k) = \text{constant} . \qquad (28)$$

Dit is de zg. bewegingsintegraal van Jacobi.

In het belangrijke geval dat de transformatieformules van $\vec{r}_\upsilon$ naar de q_k's niet expliciet van t afhangen, wordt T homogeen kwadratisch in de $\dot{q}_k$ (vgl. opmerking p.16). Dan geldt volgens een stelling van Euler

$$\sum_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k = 2\,T .$$

In dit geval is

$$\sum p_k \dot{q}_k - L = T + V \qquad (29)$$

en is dus $\tilde{H}$ gelijk aan de totale energie.

Als bovendien $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$ dan wordt de bewegingsintegraal van Jacobi juist de energieintegraal en hebben we

$$\tilde{H}(q_k,\dot{q}_k) = T + V = \text{constant}. \qquad (30)$$

Het is gebruikelijk om door middel van $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$ de snelheden in de functie $\tilde{H}$ te elimineren en uit te drukken in de p_k. Dan wordt

$$\tilde{H}(q_k,\dot{q}_k) = H(p_k,q_k).$$

Deze functie H noemt men de hamiltoniaan. Onder de genoemde voorwaarden

stelt H de totale energie voor van het systeem en blijft gedurende de beweging constant. (L niet expliciet van t af en T homogeen kwadratisch in de $\dot{q}_k$).

Opmerking: Als een zekere coördinaat q_ℓ niet in L voorkomt ($\dot{q}_\ell$ mag wel) dan spreken we van een cyclische of ignorabele coördinaat.
Dan is $\frac{\partial L}{\partial q_\ell} = 0$ en dus $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\ell} = p_\ell$ = constant.

Voorbeeld: Stel q_1 is een cyclische coördinaat zodanig dat als q_1 met een zeker bedrag ℓ toeneemt alle x_υ's met dat bedrag toenemen en de y_υ z_υ onveranderd blijven. Een verandering van q_1 stelt dus een translatie van het hele systeem in de x-richting voor. De nevencondities moeten dit dus toelaten. Cyclisch betekent bovendien dat dan de potentiële energie niet verandert. De kinetische energie hangt nl. niet af van zodanige coördinaat.

$$\left(\frac{\partial T}{\partial q_1} = \sum_\upsilon m_\upsilon \left(\dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial q_1}\right) \text{ en } \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial q_1} = \frac{d}{dt}\frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_1} = 0 \text{ want } \frac{\partial x_\upsilon}{\partial q_1} = 1 \quad \frac{\partial y_\upsilon}{\partial q_1} = 0\right.$$

$$\left.\frac{\partial z_\upsilon}{\partial q_1} = 0. \text{ Dus } \frac{\partial T}{\partial q_1} = 0\right).$$

q_1 is bv. de x coördinaat van het zwaartepunt, de andere q's zijn relatieve coördinaten. Nu is:

$$p_1 = \sum m_\upsilon \left(\dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_\upsilon}{\partial \dot{q}_1}\right) = \sum_\upsilon m_\upsilon \left(\dot{\vec{r}}_\upsilon \cdot \frac{\partial \vec{r}_\upsilon}{\partial q_1}\right) = \sum_\upsilon m_\upsilon \dot{x}_\upsilon = \text{const.}$$

Als dus een mechanisch systeem in zijn geheel een translatie in een bepaalde richting toelaat zonder dat de potentiële energie daarbij verandert, dan is de component van de totale impuls in die richting constant. We zeggen dat het systeem invariant is voor translatie in die richting. Uit zo'n invariantie volgt dus een behoudswet.

Iets dergelijks geldt als een systeem een rotatie om zekere as toelaat zonder dat de potentiële energie daarbij verandert. Invariantie voor rotatie. Dan is de component van het impulsmoment langs die richting constant.

5. Elektron in een elektromagnetisch veld.

De krachten hangen hier van de snelheid af; denk maar aan de Lorentzkracht. Als we echter een functie $V(q_k, \dot{q}_k, t)$ hebben zodanig dat

$$Q_k = -\frac{\partial V}{\partial q_k} + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_k}\right) \tag{32}$$

dan is het duidelijk dat uit

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_k} = Q_k$$

volgt, als we weer invoeren $L = T - V$,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0,$$

d.w.z. de zelfde vorm van de Lagrangevgl. van de 2^e soort, maar nu voor een gegeneraliseerd geval. We noemen

$$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial V}{\partial \dot{q}_k} \tag{33}$$

nu de gegeneraliseerde impuls. Als L niet expliciet van de tijd afhangt is

$$\sum p_k \dot{q}_k - L = H$$

weer een constante, H is echter niet meer gelijk aan T + V. Wel kan men laten zien dat H de totale energie voorstelt en niet T + V. (Kijk naar arbeid door de krachten Q_k verricht.)

Het hier beschouwde geval doet zich voor bij een elektron in een elektromagnetisch veld.

We nemen voor

$$V(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = e \left\{ \varphi(r,t) - \frac{\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}(r,t)}{e} \right\} \qquad (34)$$

(e is de lading van het elektron),

waarbij φ en A de scalaire resp. vectorpotentiaal voorstellen.

Neem maar: (Bedenk dat $\vec{B} = \text{rot } \vec{A} \qquad \vec{E} = - \text{grad } \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$).

$$Q_x = - \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{x}} \right) = - e \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{e}{c} \frac{dA_x}{dt} + \frac{e}{c} \left(\dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right)$$

$$= - e \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} - \frac{e}{c} \left\{ \frac{\partial A_x}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \dot{z} - \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} - \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} - \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right\}$$

$$= e \left\{ E_x + \frac{1}{c} (\vec{v} \wedge \vec{B})_x \right\} , \qquad (35)$$

en dit is juist de x-component van de Lorentzkracht.

Ook voor een elektron in een elektromagnetisch veld gelden dus de Lagrange vgl. van de 2^e soort met de lagrangiaan:

$$L = \tfrac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - e \left(\varphi - \frac{\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}}{c} \right) \qquad (36)$$

De gegeneraliseerde impuls

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \dot{x} + \frac{e}{c} A_x \neq \frac{\partial T}{\partial \dot{x}} . \qquad (37)$$

De hamiltoniaan wordt: $\left(\tilde{H} = \tfrac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^{\,2} + e \varphi (\vec{r}, t) \right)$

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(r,t) \right\}^2 + e \varphi (\vec{r}, t) \neq T + V .$$

Hoofdstuk II Kleine trillingen.

1. Bewegingsvergelijkingen en seculaire vergelijking.

Eerst wil ik nog even herinneren aan ééndimensionale trillingsproblemen die u reeds bent tegengekomen, bv. de harmonische oscillator of de mathematische slinger. Als we krachten hebben die alleen van x afhangen dan hebben we steeds ook een potentiaal zodat

$$K(x) = -\frac{dV(x)}{dx} .$$

We spreken van een evenwichtsstand als er een waarde van x is waarvoor $K(x) = 0 = \frac{dV}{dx}$. We kiezen die evenwichtsstand als nulpunt en ontwikkelen:

$$V(x) = V(0) + \frac{dV}{dx}\bigg|_{x=o} \cdot x + \tfrac{1}{2}\frac{d^2V}{dx^2}\bigg|_{x=o} x^2 + \ldots\ldots$$

V_o is willekeurig en kunnen we 0 kiezen. De lineaire term verdwijnt omdat we ontwikkelen rondom een evenwichtsstand. We beperken ons tot kleine uitwijkingen en breken af na de kwadratische term.

Dus $$V(x) = \tfrac{1}{2}\,a\,x^2 \qquad a = \left(\frac{d^2V}{dx^2}\right)_{x=o} .$$

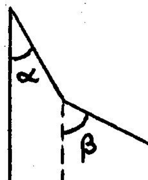
De bewegingsvgl. luidt dan: $m\ddot{x} + a x = 0$.

Als V een minimum heeft in 0, dan is $a > 0$ stabiel evenwicht.

$$x = x_o \sin\left(\sqrt{\frac{a}{m}}\,t + \varphi\right).$$

Als V een maximum heeft in 0, is $a < 0$ labiel evenwicht. Exponentiële oplossing.

We nemen nu een probleem met n vrijheidsgraden. De coördinaten hoeven geen rechthoekige cartesiaanse te zijn, we nemen gegeneraliseerde coördinaten. Bv. dubbele slinger : hoeken α en β. Verder toepassingen bij molecuultrillingen, kristalroostertrillingen etc. We zullen zien dat we ook in



het algemene geval van kleine trillingen het probleem kunnen terugbrengen tot dat van n ongekoppelde harmonische oscillatoren.

<u>Onderstel:</u> α) Er is een potentiaal die niet van t afhangt, $V(q_1 \dots q_n)$.

β) De functies $\vec{r}_\upsilon(q_k, t)$ hangen <u>niet</u> expliciet van t af. Dan wordt zoals we gezien hebben de kinetische energie homogeen kwadratisch in de $\dot{q}_k$.

$$T = T(q_k, \dot{q}_k).$$

γ) Stel er is een evenwichtsconfiguratie, waar de krachten nul zijn, dus

$$\left(\frac{\partial V}{\partial q_k}\right)_0 = 0 \qquad \text{voor alle } k.$$

We geven de coördinaten q_k in deze configuratie de waarde nul. We gaan nu V weer rondom de evenwichtsstand ontwikkelen en breken af na de kwadratische term:

$$V(q_1 \dots q_n) = \frac{1}{2} \sum_{k\ell} b_{k\ell}\, q_k\, q_\ell \tag{1}$$

waar

$$b_{k\ell} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_k\, \partial q_\ell}\right)_0 = b_{\ell k}\,. \tag{2}$$

De kinetische energie is algemeen:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell} a_{k\ell}\,(q_1 \dots q_n)\, \dot{q}_k\, \dot{q}_\ell\,. \tag{3}$$

We kunnen ons hier de functies $a_{k\ell}(q_1 \dots q_n)$ ook weer in Taylorreeksen ontwikkeld denken en we zullen hierin alleen de eerste (constante) term meenemen, zodat we bij T evenver gaan (kwadratisch) als bij V.

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k\ell} a_{k\ell}\, \dot{q}_k\, \dot{q}_\ell \tag{4}$$

waarbij we kiezen $a_{k\ell} = a_{\ell k}$.

Als de q's Cartesiaanse coördinaten zouden zijn, zou $a_{k\ell} = m_k \delta_{k\ell}$ en is (4) geen benadering voor kleine uitwijkingen maar exact.

De Lagrangevergelijkingen van de 2^e soort luiden:

$$\sum_\ell a_{k\ell}\, \ddot{q}_\ell + \sum_\ell b_{k\ell}\, q_\ell = 0 . \qquad k = 1,2...n \qquad (5)$$

Deze gekoppelde vergelijkingen kunnen worden opgelost door te stellen:

$$q_k(t) = A_k\, e^{i\omega t} \qquad (6)$$

waarin de constanten ω en A_k (op een gemeenschappelijke factor na) bepaald kunnen worden door invullen in (5). Onze coördinaten zijn uiteraard reëel. We nemen derhalve van de verkregen oplossing het reële deel (dit is zelf ook een oplossing).

Na invulling vinden we:

$$\sum_\ell \left(- \omega^2 a_{k\ell} + b_{k\ell} \right) A_\ell = 0 . \qquad (7)$$

Hier staan n homogene lineaire vgl. met n onbekenden A_ℓ, die slechts een niet-triviale oplossing hebben als de determinant = 0

$$\det \left| - \omega^2 a_{k\ell} + b_{k\ell} \right| = 0 \qquad (8)$$

de zg. seculaire vergelijking. Dit is een n-de graadsvergelijking voor ω^2. Noemen we $\omega^2 = \lambda$. We krijgen in het algemeen n wortels λ_j (j=1...n) en voor iedere j vinden we ook een stel $A_{j\ell}$. Als de wortels verschillend zijn kunnen we de $A_{j\ell}$ bepalen (voor vaste j) op een constante factor na. We noemen λ_j de eigenwaarden en de rijen $A_{j\ell}$ de eigenvectoren van ons probleem. Voor iedere j hebben we een zg. eigentrilling of normaaltrilling, ook wel hoofdtrilling.

2. Eigentrillingen en eigenwaarden.

In matrixvorm geschreven luidt (7):

$$a\lambda A = bA. \qquad (9)$$

Als a de eenheidsmatrix was ($a_{k\ell} = \delta_{k\ell}$) dan stond hier het eigenwaardenprobleem van een symmetrische n bij n matrix. Ons probleem is dus een beetje gecompliceerder. Voor een bepaalde j wordt (7) nu:

$$\sum_{\ell} \left(a_{k\ell}\,\lambda_j - b_{k\ell}\right) A_{j\ell} = 0. \qquad (10)$$

Noemen we $a_{k\ell}\,\lambda_j - b_{k\ell}$ even $c_{k\ell}^{(j)}$. Omdat de determinant van dit stelsel 0 is mogen we één van de vgl. wel weglaten. De $A_{j\ell}$ verhouden zich (j vast) als de minoren van de elementen van een willekeurige rij. Noemen we de minor van $c_{k\ell}^{(j)}$ $C_{k\ell}^{(j)}$ dan wordt:

$$A_{jk} = C_j\, C_{ik}^{(j)} \qquad \text{met i willekeurig.} \qquad (11)$$

De $C_{ik}^{(j)}$ zijn reëel, want de λ_j zijn reëel zoals we direct zullen bewijzen. C_j is een willekeurig complex getal.

De j-de eigentrilling is nu:

$$q_k^{(j)} = \operatorname{Re} A_{jk}\, e^{i\omega_j t} = |C_j|\, C_{ik}^{(j)} \cos(\omega_j t + \varphi_j)\,. \qquad (12)$$

φ_j is het argument van C_j. $\omega_j = \sqrt{\lambda_j}$. In een eigentrilling hebben alle q_k's dezelfde fase, dezelfde frequentie en een vaste amplitude verhouding. Ze gaan bv. tegelijk door de evenwichtsstand. De amplitude verhoudingen worden bepaald door de traagheden ($a_{k\ell}$) en de stijfheden ($b_{k\ell}$) van het systeem. De algemene oplossing van ons trillingsprobleem is nu een willekeurige superpositie van eigentrillingen.

<u>Bewijs dat de λ_j reëel zijn.</u> <u>Stelling van Sylvester:</u> Als één der kwadratische vormen positief definiet is, zijn de eigenwaarden λ_j reëel en zijn de eigenvectoren "orthogonaal". In ons geval is inderdaad T een positief definiete kwadratische vorm.

Er geldt:

$$\lambda_j \sum_{\ell} a_{k\ell} A_{j\ell} = \sum_{\ell} b_{k\ell} A_{j\ell}\text{, vermenigvuldig met } A^*_{ik} \text{ en sommeer over k}$$

$$\lambda^*_i \sum_{k} a_{k\ell} A^*_{ik} = \sum_{k} b_{k\ell} A^*_{ik}\text{, vermenigvuldig met } A_{j\ell} \text{ en sommeer over } \ell \text{ .}$$

Als we vervolgens aftrekken vinden we

$$(\lambda_j - \lambda^*_i) \sum_{k\ell} a_{k\ell} A^*_{ik} A_{j\ell} = 0 \text{ .} \tag{13}$$

Nemen we nu $i = j$ en stellen we $A_{ik} = \alpha_{ik} + i\beta_{ik}$ dan wordt de dubbele som in (13):

$$\sum_{k\ell} a_{k\ell} \alpha_k \alpha_\ell + \sum_{k\ell} a_{k\ell} \beta_k \beta_\ell + i \sum_{k\ell} a_{k\ell} (\alpha_k\beta_\ell - \alpha_\ell\beta_k) \text{ .}$$

De laatste term is nul vanwege de symmetrie van $a_{k\ell}$.

De eerste beide sommen zijn nu positief definiet $\Sigma\, a_{k\ell}\, \dot{q}_k\, \dot{q}_\ell > 0$ voor $\dot{q}_k \neq 0$. We zien dus dat uit (13) volgt:

$$\lambda_i = \lambda^*_i \qquad \text{dwz. de eigenwaarden zijn reëel.}$$

We hebben zojuist gezien dat $\sum_{k\ell} a_{k\ell} A^*_{ik} A_{i\ell}$ positief definiet is, als $\sum a_{k\ell} x_k x_\ell$ positief definiet is.

Uit $$\lambda_i \sum_{k\ell} a_{k\ell} A^*_{ik} A_{i\ell} = \sum_{k\ell} b_{k\ell} A^*_{ik} A_{i\ell}$$

volgt

$$\lambda_i = \frac{V(A^*_{ik}, A_{i\ell})}{T(A^*_{ik}, A_{i\ell})} . \qquad (14)$$

Is nu behalve de kinetische energie ook de potentiële energie nog positief definiet dan zijn alle $\lambda_i > 0$ en dus alle ω_i reëel. In dit geval heeft de potentiële energie een minimum in de evenwichtsstand, we spreken van stabiel evenwicht en de oplossingen zijn werkelijk oscillatorisch.

Uit (13) volgt verder voor $\lambda_i \neq \lambda_j$:

$$\sum_{k\ell} a_{k\ell} A^*_{ik} A_{j\ell} = 0 . \qquad (15)$$

Dwz. de eigenvectoren behorende bij verschillende eigenwaarden zijn "orthogonaal" in de bovenstaande zin. We kunnen de A_{ik} nog zo normeren, dat we kunnen schrijven

$$\sum_{k\ell} a_{k\ell} A^*_{ik} A_{j\ell} = \delta_{ij} . \qquad (16)$$

Uit $\lambda_j \sum_{\ell} a_{k\ell} A_{j\ell} = \sum_{\ell} b_{k\ell} A_{j\ell}$ volgt door vermenigvuldiging met A^*_{ik}, sommatie over k en toepassing van (16)

$$\lambda_j \delta_{ij} = \sum_{k\ell} b_{k\ell} A^*_{ik} A_{j\ell} . \qquad (17)$$

De hier gegeven oplossing van het probleem der kleine trillingen is reeds afkomstig van Lagrange (1762). Heeft de seculaire vgl. (8) meervoudige wortels, dan spreekt men van ontaarding. Lagrange dacht dat er dan oplossingen waren van de vorm $t^p e^{i\omega t}$ (zoals bij ééndimensionale gedempte slinger in grensgeval van aperiodiciteit). Pas in 1858 werd door Weierstrass de juiste oplossing gegeven: Stel dat λ_j de enige dubbele wortel is. Dan krijgt het stelsel lineaire vgl. de rang $n-2$ of

m.a.w. we mogen nu twee A_{jk} willekeurig kiezen. We krijgen dan toch het juiste aantal integratieconstanten.

$\lambda_j = 0$ betekent dat deze trillingswijze geen eigenlijke trilling is. Nultrilling, nulfrequentie. Men spreekt hier van indifferent evenwicht. Voorbeeld bij molecuultrillingen. De potentiële energie verandert niet bij translatie van het molecuul in zijn geheel. Dit geeft aanleiding tot 3 nulfrequenties. Hetzelfde geldt voor rotaties. Bij een lineair molecuul geeft dit bovendien 2, bij een niet-lineair molecuul 3 nulfrequenties.

3. Hoofdassentransformatie.

We kunnen het probleem der kleine trillingen ook aanpakken met behulp van een zg. hoofdassentransformatie, die op vele gebieden der natuurkunde (ook in de meetkunde) een belangrijke rol speelt. Men kan ook spreken van diagonalisatie van matrices.

We zullen nl. laten zien dat we beide kwadratische vormen T en V (waarbij T positief definiet is) door één lineaire transformatie gelijktijdig op hoofdassen kunnen brengen. Dwz. dat in de nieuwe variabelen alle mengproducten verdwenen zijn. In de nieuwe variabelen worden dan de Lagrangevergelijkingen bijzonder eenvoudig, ze zijn nl.niet langer gekoppeld. Elke nieuwe variabele stelt een eigentrilling voor.

Ik wil u eerst even herinneren aan het geval van één kwadratische vorm

$$\sum b_{k\ell}\, x_k\, x_\ell \; .$$

Men kan deze door een orthogonale transformatie

$$x_k = \sum_i p_{ik}\, \xi_i \quad \text{met} \quad \sum_k p_{ik}\, p_{jk} = \delta_{ij} \qquad (18)$$

op hoofdassen brengen, dwz. dat we na uitvoering der transformatie

krijgen

$$\sum_i \lambda_i \xi_i^2 . \tag{19}$$

Bekijk daartoe het eigenwaarde probleem

$$\sum_\ell b_{k\ell} x_\ell = \lambda x_k \quad \text{of} \quad \sum_\ell \left(b_{k\ell} - \lambda \delta_{k\ell}\right) x_\ell = 0 \tag{20}$$

waartoe we komen als we vragen naar de extrema van $\sum_{k\ell} b_{k\ell} x_k x_\ell$ onder bijvoorwaarde $\sum_k x_k^2 = 1$. (20) zijn weer n homogene lineaire vergelijkingen. Om ze op te lossen moet de determinant nul gesteld worden. We vinden n reële wortels λ_i. Bij elke eigenwaarde λ_i kunnen we dan een rij x-waarden vinden, die op een constante factor na bepaald zijn. We normeren deze eigenvectoren, die we p_{ik} noemen zodat we weer hebben (orthogonaliteit!)

$$\sum_k p_{ik} p_{jk} = \delta_{ij} .$$

We kiezen nu de matrix p_{ik}, die orthogonaal is, als transformatiematrix.

$$\xi_i = \sum_k p_{ik} x_k \quad \text{of} \quad x_k = \sum_i p_{ik} \xi_i . \tag{21}$$

De eigenvectoren $p_{1k}, p_{2k}, \ldots$ zijn de nieuwe basis.

Nu hebben we voor de p's

$$\sum_\ell b_{k\ell} p_{j\ell} = \lambda_j p_{jk}$$

$$\sum_{k\ell} b_{k\ell} p_{ik} p_{j\ell} = \lambda_j \sum_k p_{ik} p_{jk} = \lambda_j \delta_{ij} . \tag{22}$$

Dan gaat de kwadratische vorm $\sum b_{k\ell} x_k x_\ell$ over in:

$$\sum_{k\ell} b_{k\ell} x_k x_\ell = \sum_{k\ell} b_{k\ell} \sum_{ij} p_{ik}\xi_i \sum_j p_{j\ell}\xi_j = \sum_{ij} \lambda_j \delta_{ij} \xi_i \xi_j = \sum_i \lambda_i \xi_i^2 \ . \qquad (23)$$

Opmerking:

De lineaire vergelijkingen (20) hebben een eenvoudige meetkundige betekenis. De vgl. $\sum_{k\ell} b_{k\ell} x_k x_\ell$ = const. stelt een n-dimensionale ellipsoide voor. De uitdrukkingen $\sum_\ell b_{k\ell} x_\ell$ stellen de richting van de normaal in het punt x_k voor. We vragen in (20) dus naar die richtingen waarvoor de normaal juist langs de voerstraal valt. Dit is inderdaad de voorwaarde voor de hoofdassen van de ellipsoide.

Nu hebben we in ons probleem te maken met 2 kwadratische vormen waarvan één positief definiet is. We willen deze door één lineaire (niet meer orthogonale) transformatie beide op hoofdassen brengen.

Bekijk daartoe het eigenwaarde probleem

$$\sum_\ell \left(b_{k\ell} - \lambda a_{k\ell}\right) x_\ell = 0 \ . \qquad (24)$$

Merk op dat dit juist ons probleem (7) is.

We noemen de eigenwaarden weer λ_i(reëel) en de eigenvectoren die daarbij horen p_{ik} ("orthogonaal"). Normeer de eigenvectoren zo dat

$$\sum a_{k\ell}\, p_{ik}\, p_{j\ell} = \delta_{ij} \ .$$

We hebben nu volgens (24)

$$\sum_\ell b_{k\ell}\, p_{j\ell} = \lambda_j \sum_\ell a_{k\ell}\, p_{j\ell}$$

en hieruit volgt:

$$\sum_{k\ell} b_{k\ell}\, p_{ik}\, p_{j\ell} = \lambda_j \sum_{k\ell} a_{k\ell}\, p_{ik}\, p_{j\ell} = \lambda_j\, \delta_{ij} \ . \qquad (25)$$

Voeren we nu weer uit de transformatie

$$x_k = \sum_i p_{ik}\, \xi_i \tag{26}$$

dan wordt

$$\sum_{k\ell} a_{k\ell}\, x_k\, x_\ell = \sum_i \xi_i^2 .$$

$$\sum_{k\ell} b_{k\ell}\, x_k\, x_\ell = \sum_i \lambda_i\, \xi_i^2 . \tag{27}$$

Beide kwadratische vormen zijn op hoofdassen.

Voor de nieuwe coördinaten ξ_i worden de Lagrangevergelijkingen

$$\ddot{\xi}_i + \lambda_i\, \xi_i = 0 . \qquad \left(q_k = \sum_i p_{ik}\, \xi_i\right) \quad \left(\dot{q}_k = \sum_i p_{ik}\, \dot{\xi}_i\right)$$

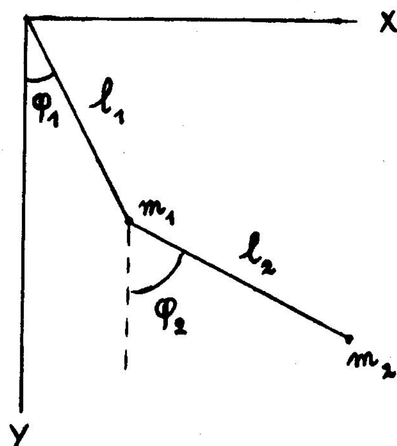
De ξ's heten normaalcoördinaten, de assen ervan vallen langs de eigenvectoren p_{ik}. Ik merk op dat wat we hier p_{ik} genoemd hebben op pag. 28 was A_{ik}.

$$q_k = \sum_i p_{ik}\, \xi_i = \sum_i p_{ik}\, C_i \cos(\omega_i t + \varphi_i).$$

Men kan de hoofdassentransformatie ook stapsgewijs uitvoeren. Eerst T door een orthogonale transformatie op hoofdassen. Alle eigenwaarden zijn positief. Dan gaan we een schaaltransformatie (contractie) toepassen en maken daarmee T tot een som van kwadraten. V is inmiddels in een andere kwadratische vorm overgegaan, die we nu door een nieuwe orthogonale transformatie (die T invariant laat) op hoofdassen brengen.

Toepassing:

1° De dubbele slinger.



We beschouwen kleine uitwijkingen uitsluitend in het xy-vlak.

$$T_1 = \tfrac{1}{2} m_1 \ell_1^2 \dot{\varphi}_1^2$$

$$T_2 = \tfrac{1}{2} m_2 (\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2).$$

Nu is $x_2 = \ell_1 \sin \varphi_1 + \ell_2 \sin \varphi_2$

$$y_2 = \ell_1 \cos \varphi_1 + \ell_2 \cos \varphi_2.$$

$$T_2 = \tfrac{1}{2} m_2 \left(\ell_1^2 \dot{\varphi}_1^2 + \ell_2^2 \dot{\varphi}_2^2 + 2\ell_1 \ell_2 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)\right)$$

$$\sim \tfrac{1}{2} m_2 \left(\ell_1^2 \dot{\varphi}_1^2 + \ell_2^2 \dot{\varphi}_2^2 + 2\ell_1 \ell_2 \dot{\varphi}_1 \dot{\varphi}_2\right).$$

$$V = (m_1 + m_2) g \ell_1 (1 - \cos \varphi_1) + m_2 g \ell_2 (1 - \cos \varphi_2) \sim \tfrac{1}{2}(m_1 + m_2) g \ell_1 \varphi_1^2 + \tfrac{1}{2} m_2 g \ell_2 \varphi_2^2.$$

Bepaal de eigenfrequenties. Laat zien dat λ_1 en λ_2 positief zijn.
Neem het speciale geval $m_1 = m_2$ $\ell_1 = \ell_2$ en bereken de eigenfrequenties en de amplitudeverhoudingen der beide eigentrillingen.

Antwoord: $\dfrac{\lambda_1}{g} = \dfrac{2 + \sqrt{2}}{\ell}$ $\qquad \dfrac{\lambda_2}{g} = \dfrac{2 - \sqrt{2}}{\ell}$

$$\frac{\varphi_2}{\varphi_1} = -\sqrt{2} \qquad \frac{\varphi_2}{\varphi_1} = \sqrt{2}.$$

2°



Gegeven: 3 gelijke puntmassa's (massa m), verbonden door 2 gelijke veren (veerconstante f). Beschouw alleen bewegingen in de richting van de verbindingslijn. Noem de uitwijkingen uit de evenwichtsstand respec-

tievelijk u_1, u_2, u_3. Dan is:

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{u}_1^2 + \dot{u}_2^2 + \dot{u}_3^2)$$

$$V = \frac{1}{2} f (u_2 - u_1)^2 + \frac{1}{2} f (u_3 - u_2)^2 .$$

Bepaal de eigenfrequenties en de eigentrillingen.

Hoofdstuk III Het principe van Hamilton en de Hamiltonvergelijkingen.

1. Variatierekening.

De tot nu toe behandelde mechanica was in hoofdzaak reeds voor 1800 bekend en gegroepeerd rondom de vergelijkingen van Newton en Lagrange. Omstreeks 1835 hebben Hamilton en Jacobi onafhankelijk van elkaar een algemene mathematische theorie opgesteld om de differentiaalvergelijkingen te integreren. Deze is als algemene theorie zeer belangrijk, doch wordt voor het oplossen van speciale problemen niet vaak toegepast. De theorie van Jacobi-Hamilton is ook voor latere ontwikkeling van de quantummechanica van de grootste betekenis geweest.

We hebben al eens gewerkt met een z.g. differentiaalprincipe, n.l. dat van d'Alembert. Dit kwam in de plaats van de grondvergelijking, terwijl de bewegingswetten er een gevolg van zijn. We behandelen nu enkele z.g. integraalprincipes, die direct de hele baan karakteriseren. We komen hier op het terrein van de variatierekening (Courant - Hilbert I, Frank - von Mises o.a. I, 881). Het grondprobleem is hier het volgende. We zoeken een functie $y = y(x)$ in een interval (x_1, x_2) zodanig dat

$$I \equiv \int_{x_1}^{x_2} F(x, y, \frac{dy}{dx})\, dx \qquad (1)$$

stationnair is. De functie $F(x, y, y')$ is bekend en $y(x_1)$, $y(x_2)$ hebben

voorgeschreven waarden.

We leiden een noodzakelijke voorwaarde voor $y(x)$ af. Zij $y(x)$ de gezochte functie. Beschouwen we verder functies $y(x) + \alpha\eta(x)$, waarin $\eta(x)$ een willekeurige functie is, die nul is in x_1 en x_2. De uitdrukking (1) wordt nu een functie van α. De noodzakelijke voorwaarde voor het extreem zijn van I is dan:

$$\left(\frac{dI}{d\alpha}\right)_{\alpha=0} = 0,$$

of

$$\int_{x_1}^{x_2} \left\{ \frac{\partial F}{\partial y}\, \eta(x) + \frac{\partial F}{\partial y'}\, \eta'(x) \right\} dx = 0.$$

Partiële integratie van de tweede term van de integrand:

$$\int_{x_1}^{x_2} \left\{ \frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y'} \right\} \eta(x)\, dx = 0.$$

Er geldt nu de volgende hulpstelling, die zich gemakkelijk laat bewijzen. Als: $\int_{x_1}^{x_2} f(x)\eta(x)dx = 0$ voor alle mogelijke functies $\eta(x)$, die voldoen aan $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$, dan zal $f(x) \equiv 0$. Een noodzakelijk gevolg van het variatieprobleem

$$\delta \int_{x_1}^{x_2} F(x,y,y')\, dx = 0,$$

is dus dat y moet voldoen aan de zg. differentiaalvergelijking van Euler:

$$\frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial y'} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0.$$

Enige uitbreidingen :

a. We kunnen vragen naar de van elkaar onafhankelijke functies

$$q_1(t), \ldots\ldots, q_n(t),$$

die de integraal

$$I = \int_{t_1}^{t_2} F(t,q_k,\dot{q}_k)\, dt$$

stationnair maken, waarbij $q_k(t_1)$ en $q_k(t_2)$ weer voorgeschreven zijn.

Men schrijft weer:

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} F(t,q_k,\dot{q}_k)\, dt = 0 .$$

Nu is:

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \sum_k \left\{ \frac{\partial F}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial F}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right\} dt = 0 .$$

Partieel integreren geeft weer:

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_k \left\{ \frac{\partial F}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial F}{\partial \dot{q}_k} \right\} \delta q_k dt = 0 .$$

Daar dit moet gelden voor willekeurige δq_k en de q_k onafhankelijk zijn, moet weer:

$$\frac{\partial F}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial F}{\partial \dot{q}_k} = 0 \qquad (k = 1,\ldots\ldots,n) \qquad (2)$$

We zien hieruit, dat de Lagrangevergelijkingen feitelijk de Eulervergelijkingen zijn van het variatieprobleem

$$\delta \int L\, d t = 0 .$$

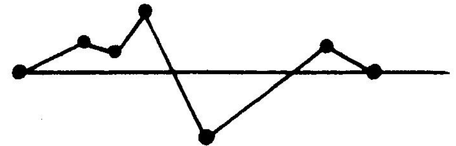
Bij deze formulering van het bewijs zien we ook direct, dat omgekeerd, wanneer de differentiaalvergelijkingen van Euler (2) gelden, dan ook

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} F\, d t = 0 .$$

b. Hetzelfde probleem met 2 onafhankelijke variabelen t en x luidt: zoek de functie y(t,x) waarvoor

$$\delta \iint_G F(t,x,y,y_t,y_x)\,dt\,dx = 0 . \qquad (3)$$

De functie y(t,x) is op de rand van G voorgeschreven. In plaats van het discrete aantal vrijheidsgraden $q_1,\dots.q_k$ geeft x nu continu oneindig veel vrijheidsgraden. Dit geval doet zich voor wanneer van het systeem van massapunten, zoals getekend in de figuur, overgegaan wordt tot het limietgeval, waarin ∞ veel massapunten een oneindig kleine onderlinge afstand hebben.



Uit deze limietovergang kunnen we de bewegingsvergelijking van de trillende snaar opstellen. Een tweedimensionaal geval treedt op bij een trillend membraan, een driedimensionaal bij een trillende luchtmassa.

Op de reeds eerder beschreven manier vinden we de vergelijking van Euler voor dit vraagstuk:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial F}{\partial y_t} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial F}{\partial y_x} - \frac{\partial F}{\partial y} = 0 . \qquad (4)$$

De Lagrangiaan voor de trillende snaar is:

$$L = \int \left\{ \tfrac{1}{2}\rho\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)^2 - \tfrac{1}{2}S\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 \right\} dx ,$$

waarin het eerste deel de kinetische energie is en het tweede deel de potentiële energie. (ρ = massa/ cm, S = spanning). Stellen we nu $\int F\,dx \equiv L$, dan gaat (4) over in de golfvergelijking

$$\rho \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = S \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} .$$

(3), die hiermee equivalent is, wordt

$$\delta \int L\,dt = 0 .$$

Het probleem van de trillende snaar hoort feitelijk niet meer thuis in de klassieke mechanica – waarin slechts gewone differentiaalvergelijkingen optreden – maar in de veldentheorie (partiële differentiaalvergelijkingen).

c. Evenzo kan de theorie uitgebreid worden, wanneer F nog van hogere afgeleiden van de gezochte functie afhangt. (Frank - von Mises, p. 886).

d. Ook kan het nog voorkomen dat de gezochte functies aan nevenvoorwaarden voldoen. Als voorbeeld kunnen we vragen naar functies $x(t)$, $y(t)$ en $z(t)$ die voldoen aan

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} F(t,x,y,z,\dot{x},\dot{y},\dot{z}) = 0$$

met als nevenvoorwaarde: $G(x,y,z,t) = 0$.

Dit laatste stelt een in de ruimte bewegend oppervlak voor als x, y, en z de coördinaten zijn met de tijd t als parameter. Dit probleem lossen we op met de multiplicatoren-methode van Lagrange. We vinden weer:

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[\left\{ \frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial F}{\partial x} \right\} \delta x + \left\{ \frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial F}{\partial y} \right\} \delta y + \left\{ \frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{z}} - \frac{\partial F}{\partial z} \right\} \delta z \right] dt = 0 \qquad (5)$$

δx, δy en δz zijn voor vaste t niet meer willekeurig te kiezen. Ze moeten nl. voldoen aan:

$$\frac{\partial G}{\partial x}\delta x + \frac{\partial G}{\partial y}\delta y + \frac{\partial G}{\partial z}\delta z \equiv 0 .$$

Vermenigvuldiging hiervan met λ, gevolgd door integratie over t en optelling bij (5) geeft:

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[\left\{ \frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial F}{\partial x} + \lambda \frac{\partial G}{\partial x} \right\} \delta x + \ldots\ldots \right] dt = 0 .$$

We kiezen λ zodanig dat de eerste term in de integrand gelijk wordt aan nul. Tengevolge van de onafhankelijkheid van δy en δz, verdwijnen

dan ook de beide andere termen:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial F}{\partial x} + \lambda \frac{\partial G}{\partial x} = 0$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial F}{\partial y} + \lambda \frac{\partial G}{\partial y} = 0 \qquad (6)$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{z}} - \frac{\partial F}{\partial z} + \lambda \frac{\partial G}{\partial z} = 0 .$$

Opmerking: Generalisatie voor meer functies en meer nevenvoorwaarden ligt voor de hand.

2. Het principe van Hamilton.

Keren we nu terug tot de mechanica. We bekijken nog eens de vergelijkingen van Lagrange van de eerste en die van de tweede soort.

Voor n massapunten met p relaties tussen de coördinaten hadden we:

$$m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon - \vec{K}_\upsilon + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \, \mathrm{grad}_\upsilon F_j = 0 \qquad F_j(x_\upsilon, y_\upsilon, z_\upsilon, t) = 0 .$$

Voor een systeem met een potentiaal: $\vec{K}_\upsilon = - \mathrm{grad}_\upsilon V$ is deze vergelijking ook te schrijven als:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\upsilon} - \frac{\partial L}{\partial x_\upsilon} + \sum_{j=1}^{p} \lambda_j \, \mathrm{grad}_\upsilon F_j = 0 .$$

(evenzo voor y_υ, z_υ).

Deze uitdrukking hadden we ook gevonden als we de Euler vergelijkingen hadden opgespoord van het variatieprobleem met nevenvoorwaarden:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(t, \vec{r}_\upsilon, \dot{\vec{r}}_\upsilon) \, dt = 0 . \qquad F_j(x_\upsilon, y_\upsilon, z_\upsilon, t) = 0 .$$

(vergelijk (5)).

Hiermee is dus aangetoond dat de vergelijkingen van Lagrange van de eerste soort niets anders zijn dan de Eulervergelijkingen van bovenstaand variatieprobleem.

Voor een systeem met een L-functie is, als we de gegeneraliseerde coördinaten q_k noemen, waartussen geen relaties meer bestaan:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 ,$$

en dit zijn juist de Eulervergelijkingen (2) behorend bij:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L \, dt = 0 . \qquad \text{(geen nevenvoorwaarden).}$$

We hebben hier het zg. <u>principe van Hamilton</u> (1834) gevonden. Voor een holonoom systeem met een functie van Lagrange, volgen de vergelijkingen van Lagrange (voor al of niet onafhankelijke coördinaten) dus direct uit het principe van Hamilton, als dit tenminste voor juist wordt gehouden. Ook omgekeerd volgt uit de vergelijkingen van Lagrange dit principe:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L \, dt = \int_{t_1}^{t_2} \delta L \, dt = \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta q_k \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \sum_k \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right\} \delta q_k \, dt .$$

Na toepassing van de vergelijkingen van Lagrange blijkt nu, dat

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L \, dt = \sum_k p_k \, \delta q_k \Big|_{t_1}^{t_2} . \qquad (7)$$

Verstaan we onder δ een zodanige variatie, dat daarbij de grenzen niet gevarieerd worden ($\delta q_k(t_1) = \delta q_k(t_2) = 0$) dan vinden we dus:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L \, dt = 0 .$$

Door dit principe van Hamilton wordt de hele beweging gekarakteriseerd. Een voordeel is, dat in deze formulering geen bepaalde keuze van coördinaten is gedaan.

De uitdrukking $\int_{t_1}^{t_2} L\,dt$ kan opgevat worden als een functie van begin-coördinaten, eindcoördinaten en van het tijdsverschil:

$$\int_{t_1}^{t_2} L\,dt = W(q_k(t_2),\ q_k(t_1),\ t_2 - t_1)\ .$$

In deze variabelen uitgedrukt heet de functie W de principal function van Hamilton.

Er zijn nog een aantal andere integraalprincipes, die alle gemeen hebben dat de te variëren grootheid de dimensie energie maal tijd = actie heeft. (In 't Duits heet dit "Wirkung"; ook de constante van Planck h heeft deze dimensie "Wirkungsquantum".) Men vat deze integraalprincipes wel samen onder de naam principes van de kleinste actie. Dat we hier werkelijk met een minimum te maken zouden hebben, is niet altijd het geval. Een beschouwing hierover vindt men o.a. in Whittaker. Wij zullen liever zeggen: $\delta \int_{t_1}^{t_2} L\,dt = 0$ betekent dat de integraal stationnair is.

We kunnen het principe van Hamilton enigszins aanschouwelijk maken door de n onafhankelijke coördinaten q_k op te vatten als rechthoekige coördinaten van een n - dimensionale ruimte, de zg. configuratieruimte. De configuratie van het systeem op een bepaald tijdstip wordt gekarakteriseerd door een punt in deze ruimte. De beweging van het systeem wordt dan voorgesteld door een "baan", die in deze ruimte door het representatieve punt wordt doorlopen. Laat het systeem nu eens bewegen van $P_1(t_1)$ naar $P_2(t_2)$. Deze beide punten leggen 2n integratieconstanten vast, dwz. ze karakteriseren de baan eenduidig. Naast de werkelijk doorlopen baan kunnen we gevarieerde banen beschouwen, die tussen dezelfde eindpunten en eveneens in hetzelfde tijdsinterval verlopen. Het principe van Hamilton zegt nu, dat als we de werkelijke baan met deze gevarieerde banen vergelijken, $\int_{t_1}^{t_2} L\,dt$ voor de werkelijke baan stationnair is.

We zullen nu het principe van Hamilton nog eens direct uit dat van d'Alembert afleiden. Dit laatste luidde:

$$\sum_{\upsilon} (m_{\upsilon}\ddot{\vec{r}}_{\upsilon} - \vec{K}_{\upsilon}) \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon} = 0 \,, \qquad (8)$$

waarin $\vec{K}_{\upsilon}$ de bekende in- en uitwendige krachten zijn. $\delta\vec{r}_{\upsilon}$ is hierin het verschil in $\vec{r}_{\upsilon}$ voor werkelijke en gevarieerde baan op hetzelfde tijdstip en moet nog aan eventuele beperkende voorwaarden voldoen. Door de substitutie

$$\ddot{\vec{r}}_{\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon} = \frac{d}{dt}(\dot{\vec{r}}_{\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon}) - \dot{\vec{r}}_{\upsilon} \cdot \frac{d}{dt}\,\delta\vec{r}_{\upsilon} = \frac{d}{dt}(\dot{\vec{r}}_{\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon}) - \tfrac{1}{2}\delta(\dot{\vec{r}}_{\upsilon}^{\,2})$$

gaat (8) over in

$$\frac{d}{dt}\sum_{\upsilon} m_{\upsilon}(\dot{\vec{r}}_{\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon}) = \sum_{\upsilon} \tfrac{1}{2} m_{\upsilon}\delta\dot{\vec{r}}_{\upsilon}^{\,2} + \sum_{\upsilon} \vec{K}_{\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon} = \delta T + \delta A \,.$$

δT is het verschil in kinetische energie bij het doorlopen van de werkelijke en van de gevarieerde baan op hetzelfde tijdstip. δA is de door de krachten $\vec{K}_{\upsilon}$ verrichte arbeid bij de virtuele verplaatsing $\delta\vec{r}_{\upsilon}$. Integratie van $t_1 \rightarrow t_2$ geeft

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta T + \delta A)\, dt = \sum_{\upsilon} \vec{p}_{\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon} \Big|_{t_1}^{t_2} \,.$$

Omdat $\delta\vec{r}_{\upsilon}(t_1) = \delta\vec{r}_{\upsilon}(t_2) = 0$ wordt dit

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta T + \delta A)\, dt = 0 \,.$$

Schrijven we nog $\delta A = \sum_{\upsilon} \vec{K}_{\upsilon} \cdot \delta\vec{r}_{\upsilon} = \sum_{k} Q_k \delta q_k$, waarin Q_k de reeds vroeger gedefinieerde gegeneraliseerde kracht voorstelt, dan is

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta T + \sum_k Q_k \delta q_k)\, dt = 0$$

de meest algemene vorm van het principe van Hamilton, ook geldig als de krachten geen potentiaal bezitten. De Eulervergelijkingen voor dit probleem zijn

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial T}{\partial q_k} = Q_k ,$$

dus de algemene vergelijkingen van Lagrange van de 2^e soort. Voor krachten die wel een potentiaal hebben is $\delta A = - \delta V$, zodat het principe van Hamilton weer de bekende vorm krijgt:

$$\int_{t_1}^{t_2} \delta(T - V)\, dt = 0 \quad \text{of} \quad \delta \int_{t_1}^{t_2} L\, dt = 0$$

(t_1 en t_2 invariant).

We zijn nu uit het principe van d'Alembert via de Lagrangevergelijkingen tot het principe van Hamilton gekomen, en ook uit d'Alembert via Hamilton tot de vergelijkingen van Lagrange.

3. De vergelijkingen van Hamilton

We gaan uit van de vergelijkingen van Lagrange 2^e soort, n 2^e orde, gewone differentiaalvergelijkingen. Deze kunnen we meer algemeen schrijven als

$$f_i(t, q_k, \dot{q}_k, \ddot{q}_k) = 0, \qquad i = 1, \ldots, n .$$

Een dergelijk stelsel vergelijkingen kan altijd vervangen worden door een stelsel van 2n vergelijkingen van de 1^e orde. Als we nl. $\dot{q}_k = y_k$ als nieuwe afhankelijke variabelen invoeren, krijgen we

$$f_i(t, q_k, y_k, \dot{y}_k) = 0$$

$$\dot{q}_k = y_k \,.$$

In de mechanica kan dit nu bijzonder mooi gebeuren, door naast de q_k niet de $\dot{q}_k$ maar de p_k als nieuwe variabelen in te voeren.

We hebben $L = L(q_k, \dot{q}_k, t)$ en we voeren in $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$. Uit deze vergelijkingen denken we ons $\dot{q}_k$ opgelost, zodat we dan

$$\sum_k p_k \dot{q}_k - L(q_k, \dot{q}_k, t) = H(p_k, q_k, t) \qquad (9)$$

kunnen beschouwen als een functie van q_k, p_k en t. Deze functie $H(p_k, q_k, t)$ heet de <u>Hamiltoniaan</u> of de <u>Hamilton-functie</u>. Dat de $\dot{q}_k$ uit $p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$ kan worden opgelost, kunnen we gemakkelijk laten zien in het eenvoudige geval, dat V niet afhangt van de snelheden en T homogeen kwadratisch is in de snelheden. Immers dan is $p_k = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k}$ en de $\dot{q}_k$ zijn oplosbaar, als de determinant $\left|\frac{\partial^2 T}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_\ell}\right| \neq 0$. Dit is nu inderdaad het geval, want T is een positief definiete kwadratische vorm in de snelheden en een noodzakelijk gevolg daarvan is dat genoemde determinant positief is.

In het geval dat V niet van de snelheden afhangt en T homogeen kwadratisch is in de snelheden is de Hamilton functie H gelijk aan de totale energie.

Immers:

$$H = \sum_k p_k \dot{q}_k - L = \sum_k \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L = 2T - T + V = T + V \,.$$

Altijd geldt:

$$dH = \sum_k p_k d\dot{q}_k + \sum_k \dot{q}_k dp_k - \sum_k \frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k - \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial t} dt =$$

$$= \sum_k \dot{q}_k dp_k - \sum_k \frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k - \frac{\partial L}{\partial t} dt \,.$$

Hieruit volgt nu:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \qquad - \frac{\partial L}{\partial q_k} = \frac{\partial H}{\partial q_k} \qquad - \frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \ .$$

We zien hieruit dat als L niet expliciet van t afhangt dit ook voor H geldt en omgekeerd; verder, als q_k niet expliciet in L voorkomt (dus een cyclische coördinaat is), hangt ook H niet van q_k af en omgekeerd. Met behulp van de vergelijkingen van Lagrange die we kunnen schrijven:

$$\dot{p}_k = \frac{\partial L}{\partial q_k} \ ,$$

vinden we nu de zg. vergelijkingen van Hamilton, of kanonieke bewegingsvergelijkingen:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \qquad \dot{p}_k = - \frac{\partial H}{\partial q_k} \ . \tag{10}$$

Dit zijn nu 2n differentiaalvergelijkingen van de 1^e orde met 2n onbekende functies. Ze hebben een bijzonder eenvoudige vorm omdat de differentiaal quotiënten al meteen zijn opgelost.

p_k en q_k noemt men wel kanoniek aan elkaar toegevoegde variabelen.

We zijn hier van de Lagrangiaan op de Hamiltoniaan overgegaan door middel van een zg. Legendre-transformatie, die veel in de natuurkunde optreedt. In zijn eenvoudigste vorm krijgen we zo'n transformatie als volgt:

We hebben een functie $f(x,y)$ van 2 variabelen x en y. We noemen nu:

$$z = \frac{\partial f}{\partial y} \qquad g = yz - f \ .$$

Uit $z = \frac{\partial f}{\partial y}$ kunnen we y oplossen als functie van x en z, zodat we g kunnen opvatten als functie van x en z.

$$dg = ydz + zdy - \frac{\partial f}{\partial x}dx - \frac{\partial f}{\partial y}dy = ydz - \frac{\partial f}{\partial x}dx$$

zodat

$$y = \left(\frac{\partial g}{\partial z}\right)_x \quad \text{en} \quad \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_z = - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y \ .$$

Ook de overgang van $g(x,z)$ naar $f(x,y)$ is weer een Legendre-transformatie. Het is duidelijk dat de overgang van $L(q_k,\dot{q}_k,t)$ naar $H(q_k,p_n,t)$ er een voorbeeld van is. Bekende toepassingen vinden we in de thermodynamica: Van $U(S,V)$ naar $F(T,V) = U - TS$, vandaar naar $G(p,T) = F + pV$.

Behoud van energie. Bekijken we eens de afgeleide van de Hamilton-functie naar de tijd:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial H}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) + \frac{\partial H}{\partial t} .$$

Als we hierin de Hamiltonvergelijkingen (10) invullen dan vinden we:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} .$$

Als H (of wat op het zelfde neerkomt L) niet expliciet van de tijd afhangt, verandert H niet gedurende de beweging, m.a.w. is H een integraal van de beweging. In het speciale geval (maar veel voorkomend) dat $H = T + V$ gaat dit over in de wet van behoud van energie.

We hebben vroeger ingevoerd de n-dimensionale configuratieruimte. Een punt hierin geeft de configuratie van het systeem aan, maar zegt niets over de snelheden. Als de Lagrange-functie gegeven is, zijn door elk punt van de configuratieruimte nog oneindig veel banen mogelijk. Als we verder een baan in deze ruimte geven, weten we welke configuraties worden doorlopen, maar we weten nog niets over het tijdelijk verloop van de beweging. In het formalisme van Hamilton ligt het voor de hand om een 2n-dimensionale ruimte van de q_k's en de p_k's in te voeren, de zg. phaseruimte. Een punt hierin geeft zowel coördinaten als snelheden aan. Een phasebaan karakteriseert de beweging volkomen, geeft behalve de opeenvolgende configuraties ook voor elke configuratie de impulsen (en dus ook de snelheden) aan. Door elk punt van de phaseruimte gaat 1 en slechts 1 baan, immers

$$dq_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}\, dt \qquad\qquad dp_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}\, dt\,,$$

dus uitgaande van een gegeven punt geven deze vergelijkingen de raaklijn in dat punt.

We kunnen eens de vraag opwerpen, hoe een willekeurige mechanische grootheid $f(p_k, q_k, t)$ gedurende de beweging verandert. We vinden:

$$\frac{df}{dt} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k}\dot{q}_k + \frac{\partial f}{\partial p_k}\dot{p}_k\right) + \frac{\partial f}{\partial t} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial H}{\partial q_k}\right) + \frac{\partial f}{\partial t}\,. \qquad (11)$$

Voor twee willekeurige functies van coördinaten en impulsen is de haakjes-uitdrukking van <u>Poisson</u> gedefinieerd als:

$$(f,g) = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k}\frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k}\frac{\partial g}{\partial q_k}\right). \qquad (12)$$

Met behulp van deze schrijfwijze gaat (11) over in:

$$\frac{df}{dt} = (f,H) + \frac{\partial f}{\partial t}\,. \qquad (13)$$

(13) is de meest algemene vorm van de bewegingsvergelijkingen en leert ons hoe een willekeurige mechanische grootheid met de tijd verandert. Als we voor f q_k en p_k nemen, krijgen we de Hamiltonvergelijkingen terug, ook $f \equiv H$ geeft een bekend resultaat.

Het analogon in de quantummechanica van de Poissonhaakjes is de commutator:

$$\left[f_{op}, g_{op}\right] = f_{op}\, g_{op} - g_{op}\, f_{op}\,.$$

Deze spelen in de quantummechanica een fundamentele rol, allerlei stellingen die we hier met Poissonhaakjes formuleren (bv. (13)) blijven in de quantummechanica geldig als we (f,g) vervangen door $\frac{1}{i\hbar}[f,g]$.

Voorwaarde voor een bewegingsintegraal is bv. commuteerbaarheid met de H-operator.

Uit (13) volgt dat de noodzakelijke en voldoende voorwaarde opdat een functie $f(p_k, q_k)$, die niet expliciet van de tijd afhangt, een bewegingsintegraal is, dwz. constant blijft gedurende de beweging, luidt

$$(f,H) = 0 .$$

Eigenschappen van Poissonhaakjes:

$$(q_k, q_\ell) = 0 \qquad (p_k, p_\ell) = 0 \qquad (q_k, p_\ell) = \delta_{k\ell} .$$

Dit volgt direct uit de definitie (12). De quantummechanische analogieen zijn de fundamentele verwisselingsrelaties van Heisenberg.

$$(f,g) = -(g,f)$$

$$(f+g,h) = (f,h) + (g,h)$$

$$(fg,h) = (f,h)\,g + f(g,h) .$$

Verder de zgn. identiteit van Jacobi (voor bewijs zie men Goldstein):

$$(f,(g,h)) + (g,(h,f)) + (h,(f,g)) = 0 .$$

Hieruit volgt onmiddellijk de stelling van Poisson: Als f en g beide bewegingsintegralen zijn, geldt dit ook voor (f,g).

Immers:

$$\frac{d}{dt}(f,g) = ((f,g),H) = -((g,H),f) - ((H,f),g) = 0 .$$

Men late zien dat voor de componenten van het impulsmoment geldt: $L_z = (L_x, L_y)$, enz. In een centraal krachtveld zijn alle drie componenten bewegingsintegralen.

Hoofdstuk IV De viriaalstelling.

(vgl. ter Haar, Elements of Thermostatistics, pag. 10.
Becker, Theorie der Wärme, pag. 85).

Tenslotte zullen we nog kort bespreken de zg. viriaalstelling. Deze behoort eigenlijk al niet meer tot de mechanica, omdat het hier gaat om gemiddelden. We bekijken een systeem van massapunten.

De bewegingsvergelijkingen zijn:

$$m_\upsilon \ddot{\vec{r}}_\upsilon = \vec{K}_\upsilon = \vec{K}^i_\upsilon + \vec{K}^u_\upsilon \,. \qquad (1)$$

We hebben de kracht gesplitst in een uitwendige kracht $\vec{K}^u_\upsilon$ (afkomstig van eventuele uitwendige krachtvelden of bv. ook van de wand van een vat) en een inwendige kracht $\vec{K}^i_\upsilon$ afkomstig van de onderlinge wisselwerking van de massapunten.

Nu is:

$$\sum_\upsilon m_\upsilon \vec{r}_\upsilon \cdot \ddot{\vec{r}}_\upsilon = \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \cdot \vec{K}_\upsilon = \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \cdot \vec{K}^i_\upsilon + \sum_\upsilon \vec{r}_\upsilon \cdot \vec{K}^u_\upsilon \,. \qquad (2)$$

Verder is:

$$\sum_\upsilon m_\upsilon \vec{r}_\upsilon \cdot \ddot{\vec{r}}_\upsilon = \frac{d}{dt} \sum_\upsilon m_\upsilon \vec{r}_\upsilon \cdot \dot{\vec{r}}_\upsilon - \sum_\upsilon m_\upsilon \dot{\vec{r}}^{\,2}_\upsilon$$

$$= \frac{d^2}{dt^2} \tfrac{1}{2} \sum_\upsilon m_\upsilon \vec{r}^{\,2}_\upsilon - 2T, \qquad (3)$$

waarin $T = \frac{1}{2} \sum_\upsilon m_\upsilon \dot{\vec{r}}^{\,2}_\upsilon$ de kinetische energie voorstelt.

We substitueren (3) in (2) en gaan het resultaat middelen over een lang tijdsinterval. Het gemiddelde wordt aangeduid door $< \;\; >$.

$<\sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}_{\upsilon}>$ heet het <u>viriaal</u> (ingevoerd door Clausius) .

$$< \frac{d^2}{dt^2} \tfrac{1}{2} \sum_{\upsilon} m_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon}^{\,2} > = \lim_{t_2 - t_1 \to \infty} \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \frac{d^2}{dt^2} \tfrac{1}{2} \sum_{\upsilon} m_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon}^{\,2} =$$

$$= \lim_{t_2 - t_1 \to \infty} \frac{1}{t_2 - t_1} \left(\frac{d}{dt} \tfrac{1}{2} \sum_{\upsilon} m_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon}^{\,2} \right) \Bigg|_{t_1}^{t_2}$$

$$= \lim_{t_2 - t_1 \to \infty} \frac{1}{t_2 - t_1} \left(\sum_{\upsilon} m_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \dot{\vec{r}}_{\upsilon} \right) \Bigg|_{t_1}^{t_2} . \qquad (4)$$

In het algemeen zal de uitdrukking $\sum_{\upsilon} m_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \dot{\vec{r}}_{\upsilon}$ op elk tijdstip een eindige waarde hebben, als tenminste geen deeltjes naar het oneindige gaan en de snelheden ook eindig blijven.

In dat geval gaat de uitdrukking (4) in de limiet naar 0 en vinden we:

$$<\sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}_{\upsilon}> = <\sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}_{\upsilon}^{i}> + <\sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}_{\upsilon}^{u}> = -2<T> . \qquad (5)$$

Dit heet de viriaalstelling.

We zullen twee toepassingen bespreken:

1°. Stel er is een potentiële energie V, die een homogene functie is van de graad g, dwz.

$$V\left(a\vec{r}_1 , a\vec{r}_2 , \ldots a\vec{r}_n\right) = a^g \, V\left(\vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \ldots \vec{r}_n\right) .$$

Differentieer dit naar a en stel daarna a = 1 :

$$\sum_{\upsilon} \left(\vec{r}_{\upsilon} \cdot \text{grad}_{\upsilon} V \right) = g V .$$

Derhalve:

$$\text{Viriaal} = \left\langle \sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}_{\upsilon} \right\rangle = -g \langle V \rangle$$

en de viriaalstelling gaat over in

$$2 \langle T \rangle = g \langle V \rangle .$$

Kijken we bv. naar de Keplerbeweging in een ellips ($\vec{r}$ blijft hier eindig).

De potentiaal is hier $V(\vec{r}) = -\frac{\alpha}{r}$, dus $g = -1$.

Dan geldt: $2 \langle T \rangle + \langle V \rangle = 0$.

Inderdaad volgt uit een gedetailleerde berekening:

$$\langle V \rangle = -\frac{\alpha}{a}$$

$$\langle T \rangle = \frac{\alpha}{2a}$$

en de (constante) totale energie is $-\frac{\alpha}{2a}$. a is hier de halve grote as van de ellips.

2. Bekijk een gas (of vloeistof) bestaande uit N molekulen in een vat met volume V. De uitwendige krachten zijn alleen afkomstig van de wand en bedragen $-p$ (druk) per oppervlakte-eenheid. Dan is

$$\left\langle \sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}^{u}_{\upsilon} \right\rangle = -p \int r_n \, d\sigma \text{ (oppervlakte integraal)} .$$

Door toepassing van de stelling van Gauss volgt hieruit voor het uitwendige viriaal:

$$\left\langle \sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}^{u}_{\upsilon} \right\rangle = -p \int \operatorname{div} \vec{r} \, d^3 r = -3pV .$$

De viriaalstelling geeft dus:

$$3pV = 2 \langle T \rangle + \left\langle \sum_{\upsilon} \vec{r}_{\upsilon} \cdot \vec{K}^{i}_{\upsilon} \right\rangle . \qquad (7)$$

Nu is, zoals bekend (en we later nog zullen zien)

$$2\langle T\rangle = \frac{3}{2} N k T$$

waarin T in het rechter lid nu de absolute temperatuur voorstelt.

Voor een ideaal gas zijn er geen inwendige krachten en daarvoor vinden we de ideale gaswet (wet van Boyle, Gay-Lussac)

$$pV = NkT . \tag{8}$$

Voor een werkelijk gas zijn er wel intermolekulaire krachten en kunnen we in beginsel met behulp van het inwendige viriaal correcties op de ideale gaswet berekenen. Men schrijft vaak: ($v = \frac{V}{N}$, het volume per deeltje)

$$\frac{pv}{kT} = 1 + \frac{B(T)}{v} + \frac{C(T)}{v^2} + \ldots\ldots \tag{9}$$

B(T), C(T) ... heten de 2[de], 3[de], etc. viriaalcoefficient .

In Becker § 29 worden de correcties op de ideale gaswet bij benadering berekend en wordt zo de toestandsvergelijking van Van der Waals afgeleid:

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)\left(v - b\right) = kT \tag{10}$$

waarin a en b voor het gas karakteristieke constanten zijn.

We kunnen (10) ook schrijven:

$$p = \frac{kT}{v-b} - \frac{a}{v^2}$$

of:

$$\frac{pv}{kT} = 1 + \frac{b - \frac{a}{kT}}{v} + \frac{b^2}{v^2} + \frac{b^3}{v^3} + \ldots\ldots \tag{11}$$

zodat voor de vergelijking van Van der Waals de viriaalcoefficienten zijn:

$$B = b - \frac{a}{kT}$$

$$C = b^2, \quad D = b^3, \text{ etc.}$$

Instituut voor Theoretische Fysica
der Rijksuniversiteit Utrecht

oktober 1974

Werkkollege Statistische Mechanika 1974-1975

1. (Vrije halter). Beschouw twee gelijke massapunten, door een starre verbindingsstang zonder gewicht ter lengte 1 verbonden, die zich verder vrij in de ruimte kunnen bewegen.

Voer in een geschikt stel gegeneraliseerde koördinaten (evenveel koördinaten als het systeem vrijheidsgraden heeft).

Schrijf op voor dit systeem:

De Lagrangiaan.

De Lagrangevergelijkingen van de 1e en van de 2e soort.

De Hamiltoniaan.

De Hamiltonvergelijkingen.

Welke koördinaten zijn cyklisch?

Welke behoudswetten volgen hieruit?

Vindt u zo alle behouden grootheden? (Aanwijzing: In een systeem met n vrijheidsgraden zijn er 2n-1 onafhankelijke behouden grootheden.)

Bereken de kracht die de halter uitoefent op de twee massapunten als funktie van de tijd en de beginvoorwaarden. (Los daartoe op de vergelijking van Lagrange van de 1e soort.)

2. Een dubbele slinger bestaat uit een mathematische slinger (lengte l_1, massa m_1), waaraan bevestigd is een tweede (lengte l_2, massa m_2). Het ophangpunt van deze slinger is het massapunt van de eerste.

Beide slingers bewegen in één plat vlak.

Bepaal de eigenfrequenties van dit systeem.

Bereken voor kleine m_2 de eigentrillingswijzen van dit systeem.

Bestaat er een gegeneraliseerd koördinatenstelsel, zodanig dat één van de twee koördinaten cyclisch is? (Eventueel in bepaalde limietgevallen.)

Aanwijzing: Bewijs dat alle $\omega_j \neq 0$. (Algemeen geldt dat een cyklische koördinaat aanleiding geeft tot een eigenfrequentie ω gelijk aan nul, en omgekeerd.)

3. (Roterend assenstelsel).

Beschouw een vrij deeltje in een conservatief krachtenveld. Beschrijf de beweging van het deeltje (volgens Lagrange en Hamilton) in een met eenparige snelheid ω draaiend rechthoekig koördinatenstelsel.

Bereken zo de Corioliskracht en de middelpuntvliedende kracht.

Hoe kan men experimenteel een onderscheid maken tussen deze twee krachten?

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-1975 (vervolg 3.)

Veronderstel dat een waarnemer zich bevindt in een afgesloten ruimte (een "Skylab" zonder ramen bijvoorbeeld), die met eenparige snelheid ω roteert om een vaste as.
Bedenk een eenvoudig proefje hoe deze waarnemer zovel ω als de plaats van de draaias kan bepalen. (Verschillende mogelijkheden.)

4. (Halter op 2 rails).
Twee gelijke massapunten, verbonden door een halter van lengte l bewegen zich zonder wrijving elk op een rail. De twee rails kruisen elkaar onder een rechte hoek op een afstand a $(a < l)$. De kortste verbindingslijn van de twee rails is loodrecht op de richting van het zwaartekrachtsveld, terwijl de rails er elk een hoek van 45° mee maken.
Beschrijf de beweging met de Lagrangevergelijkingen van de 1e en van de 2e soort, en met de Hamiltonvergelijkingen.
Bereken de kracht die de halter uitoefent op de twee massapunten, uitgedrukt in de gekozen gegeneraliseerde koördinaat.
Met welk reeds eerder beschouwd systeem is dit systeem mathematisch equivalent?
Bediscussieer de mogelijke bewegingswijzen van het systeem als funktie van de energie.

5. Beschouw hetzelfde systeem als in opgave 4, echter nu met de verbindingsstang van de halter vervangen door een veer met rustlengte l en veerkonstante α. Neem $a = 0$.
Schrijf de Lagrangevergelijkingen van de tweede soort op.

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-1975 (vervolg 5.)

en los ze op
a) voor l = 0
b) als de versnelling van de zwaartekracht nul is.
c) Bepaal voor kleine uitwijkingen uit een evenwichtsstand de eigenfrequentie (s) van het systeem.

6. Drie gelijke puntmassa's zijn door vier gelijke veren verbonden met 2 wanden. Zij bevinden zich op één lijn, die loodrecht op die wanden staat, en kunnen alleen langs die lijn bewegen. Bereken de eigenfrequenties en eigentrillingswijzen van dit systeem, en laat zien dat de laatste orthogonaal zijn.
Onder welke omstandigheden is deze oplossing exact, ook voor grote uitwijkingen?

7. In een homogeen zwaartekrachtveld bevinden zich twee punten op niet gelijke hoogte, die zijn verbonden door een gootje, waarin een puntmassa wrijvingsloos kan glijden. De vorm van het gootje is dusdanig dat de valtijd van de puntmassa vanaf het hoogste punt naar het laagste minimaal is als de puntmassa zonder snelheid wordt losgelaten in het hoogste punt. De curve die het gootje beschrijft heeft een brachistochroon.
Stel de differentiaalvergelijking waaraan de brachistochroon voldoet, op.
Laat zien dat de cycloïde door de 2 punten en die zijn top heeft in het bovenste punt hieraan voldoet.
Schets de brachistochroon.
Wat zou de brachistochroon zijn voor het analoge probleem, waarbij echter de puntmassa een beginsnelheid $\vec{v}_0$ krijgt ?

Opmerking 1.
Een cycloïde is de baan die een punt op de omtrek van

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-1975 (vervolg 7)

een rollend wiel beschrijft, zo'n curve heeft dus als parametervoorstelling :

$$y = A(1 - \cos t)$$
$$x = A(t - \sin t)$$

Welke parameters kunnen aangepast worden zo dat deze cycloïde naast het punt (0,0) nog een ander gegeven punt (x_o , y_o) bevat ?

Opmerking 2.

De differentiaalvergelijking waaraan de brachistochroon voldoet kunt u in cartesische coördinaten terugbrengen tot een oplosbare eerste orde differentiaalvergelijking door te scheiden naar de variabelen y en $p = \frac{dy}{dx}$.
Ook kunt u de hele vergelijking vermenigvuldigen met $\frac{dy}{dx}$, waardoor er een direct integreerbare differentiaalvergelijking ontstaat.

8. Een elektrische puntlading met massa m bevindt zich in een homogeen elektrisch veld $\vec{E}$ en magnetisch veld $\vec{B}$, beide niet van de tijd afhangend, en is bovendien door een ideale veer (veerconstante α) verbonden met de oorsprong.

Schrijf op de Lagrangevergelijking van de 2e soort en de Hamiltonvergelijking en los deze op. Beschouw ook in het bijzonder het geval $\alpha = 0$.

9. Een staafje ter lengte l en massa m, met verwaarloosbare doorsnede, is vrij draaibaar opgehangen in zijn zwaartepunt, en bevindt zich in een tijdonafhankelijk magnetisch veld. De magnetische eigenschappen van het staafje worden voldoende beschreven door zijn dipoolmoment dat evenwijdig staat aan de as van het staafje. (Alle hogere multipoolmomenten zijn nul).

Beschrijf de beweging van de 2e soort en de Hamiltonvergelijking.

Herleid de vergelijkingen tot die van een 1-dimensionale oscillator.

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-1975

10. (Viriaaltheorema ideaal gas).

Beschouw een afgesloten vat Ω met volume V, waarin N puntvormig gedachte moleculen met massa m, zonder wisselwerking. Uitwendige krachten behalve die van de wand, (zoals zwaartekracht) worden verwaarloosd.

Leid voor dit systeem, het zgn. "ideale gas", uit het viriaaltheorema, de wet van Boyle-Gay Lussac af.

(Bedenk dat de gemiddelde kinetische energie per vrijheidsgraad hier ½ k T is).

11. (Ideaal gas, Ensembletheorie, Kansverdelingen).

Beschouw hetzelfde systeem als in opgave 10.

Zij ω een deelvolume van Ω van willekeurige vorm, met volume $v_o = |\omega|$, en zij $\underline{n}$ het aantal molekulen die zich op een gegeven moment in ω bevinden. ($\underline{n}$ is een "kansgrootheid" en wordt daarom onderstreept.) Wij kunnen niet $\underline{n}$ zelf berekenen, wel bijv. de kans dat $\underline{n}$ een bepaalde waarde n (n = 0,1,2,...) heeft (Deze kans zullen wij p_n noemen), mits wij een geschikt waarschijnlijkheids postulaat stellen.

A) Kies zulk een geschikt postulaat

B) Bereken p_n en schets het verloop als funktie van n. (De "Binomiaalverdeling").

Bereken m = $\underline{n}$, d.w.z. het gemiddelde aantal deel-

tjes in ω, en de variantie van $\underline{n}$, σ^2, uit $\sigma^2 = \langle(\underline{n} - m)^2\rangle$. ($\sigma$ = "standaarddeviatie").

(Aanw.: Bereken eerst de "genererende funktie" $\sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n = p(z)$ en daaruit door differentiatie, m en σ).

C) Beschouw de limiet $V \to \infty$, $N \to \infty$, maar v_o en $v = \frac{V}{N}$ vast. Laat zien dat m, σ en p_n eindig blijven, en dat in deze limiet p_n nog steeds een (diskrete) kansverdeling voorstelt (d.w.z. dat nog steeds geldt dat $\sum_{n=0}^{\infty} p_n = 1$). Dit is de Poissonverdeling. Schets deze.

D) Welke limietovergang (verschillend van die onder C) beschouwd) levert de Gaussverdeling op?

E) Tracht voorbeelden te vinden van de limiet overgangen (of "benaderingen") die met C) en D) korresponderen, bijv. in het dagelijks leven, en/of in de ensembletheorie.

12. Beschouw een één-dimensionale harmonische oscillator. De kinetische en potentiële energie worden gegeven door

$$T = \frac{m\dot{x}^2}{2} \qquad V = \tfrac{1}{2} m \omega^2 x^2 .$$

a) Bereken de met x gekonjungeerde impuls.

b) Wat is de hamiltoniaan. Los de Hamiltonvergelijkingen op.

c) Teken de baan van het deeltje in de (twee-dimensionale) faseruimte.
Verifieer de stelling van Liouville.

d) Geef de Maxwell-Boltzmann verdeling voor N deeltjes. Reken de toestandssom uit.

e) Bereken de gemiddelde energie per deeltje.

Werkkollege Statistische Mechanica 1973-75

13. Beschouw een twee-dimensionale harmonische oscillator met Hamiltoniaan

$$H(p_x, p_y, x, y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \tfrac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) .$$

Volgens het equipartitietheorema is de gemiddelde energie gelijk aan 2kT. Ga over op poolcoördinaten:

$x = r \cos \phi$.

$y = r \sin \phi$.

Bereken de met r en ϕ gekonjungeerde impulsen p_r en p_ϕ en laat zien dat de Hamiltoniaan gegeven wordt door:

$$H(p_r, p_\phi, r, \phi) = \frac{1}{2m} \left[p_r^2 + \frac{p_\phi^2}{r^2} \right] + \tfrac{1}{2} m \omega^2 r^2 .$$

Er zijn nu twee kinetische-energie-termen en één kwadratische potentiële-energieterm.

Verifieer door direkte berekening in poolkoördinaten, dat de gemiddelde energie gelijk is aan 2kT.

Wat betekent dit resultaat in verband met het equipartitietheorema ?

14. We beschouwen een ideaal gas in een zwaartekrachtveld

$V(z) = mgz.$

m is de massa van de deeltjes. We bekijken een zuil met

$0 \leq x \leq L$

$0 \leq y \leq L$

$0 \leq z \leq \infty$

a) Leid de barometrische hoogteverdeling af door de krachten op een dun laagje van het gas te berekenen.

b) Geef de Maxwell-Boltzmann-verdeling voor N deeltjes. Bereken de snelheidsverdeling op de hoogte z, en de gemiddelde snelheid.

Wat is de gemiddelde energie per deeltje op de hoogte z, en wat is de gemiddelde energie per deeltje?

Wat is de gemiddelde hoogte van de deeltjes?

c) Ons interesseert alleen de beweging in de z-richting. Voor het gemak bekijken we nu het één-dimensionale ideale gas, waarbij de plaats van een deeltje gegeven is door de koördinaat z, de impuls door p. De potentiële energie is dezelfde als boven. Los de bewegingsvergelijkingen op bij de beginvoorwaarde (p_o, z_o). Geef de vergelijking voor de baan van een deeltje in de (twee-dimensionale) faseruimte. Teken een paar mogelijke banen in de faseruimte.

15. a) Wat is (volgens Maxwell) de kans dat een deeltje een snelheid heeft die ligt tussen $\vec{v}$ en $\vec{v} + d\vec{v}$ (hiermee wordt bedoeld dat de x-component ligt tussen v_x en $v_x + dv_x$, etc.).

b) Wat is de kans dat een deeltje een snelheid heeft ~~waarvan de lengte ligt tussen v + dv.~~

c) Wat is de kans dat de energie van een deeltje ligt tussen E en E + d E , (als de energie alleen uit kinetische energie bestaat)?

d) De inhoud van een bol in een n dimensionale ruimte is

$$\frac{\pi^{\frac{1}{2}n}}{\Gamma(\frac{1}{2}n+1)} R^n,$$ waarin R de straal van de bol is.

Bereken nu de kans dat de totale energie van ν onafhankelijke deeltjes ligt tussen E en E + d E , waarbij weer de potentiële energie verwaarloosd mag worden. Bereken de gemiddelde energie, en de spreiding in de energie voor ν onafhankelijke vrije deeltjes.

e) Gegeven 1 mm^3 lucht bij kamertemperatuur, wat is dan volgens deze berekening de relatieve spreiding in de energie van dat systeem? (De temperatuur wordt exact bekend verondersteld.)

f) De kansen berekend onder c) en d) kunnen respektievelijk geschreven worden als $\rho_1(E)dE$ en $\rho_\nu(E)dE$.
Bereken voor algemene waarde van $\nu(\nu=1,2,3,\ldots)$:
1) De energie E_{max} waarvoor $\rho_\nu(E)$ een maximum heeft.
2) De gemiddelde energie E_{gem}.
Laat zien dat voor grote waarden van ν het verschil

$$|E_{gem} - E_{max}|$$

hoogstens van dezelfde orde van grootte is als de standaard-deviatie σ van de verdeling $(\rho_\nu(E)dE)$ van de energie E. (Dwz. bewijs dat $\frac{1}{\sigma}|E_{gem} - E_{max}|$ begrensd is als $\nu\to\infty$).

g) Bewijs dat

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{(als } \alpha>0) \qquad (1)$$

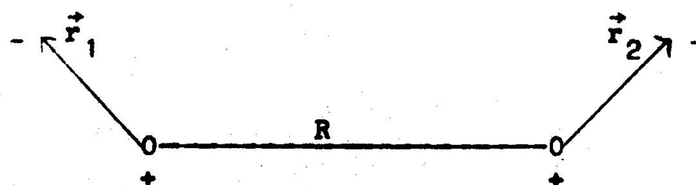
Leid hieruit af dat

$$\Gamma(\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$$

Verhef nu beide leden van (1) tot de n^{de} macht. (Schrijf het linkerlid als een n-voudige integraal). Herschrijf nu het linkerlid in termen van poolkoördinaten, en bewijs uit de zo gevonden relatie de onder d) vermelde formule voor de inhoud van een n-dimensionale bol.

16. Lees nog eens door, de grondbeginselen van de Thermodynamika, zoals bijvoorbeeld beschreven in : Becker, "Theorie der Wärme", §§ 1-12, § 13 a), § 19 en § 20, of in Fermi, "Thermodynamics", §§ 1-14 en §§ 16-18.

17. **Dipool-dipool wisselwerking tussen atomen.**
We beschouwen twee atomen (ongeladen), ieder bestaande uit een zware kern en één elektron. De elektronen zijn harmonisch gebonden aan hun kern (frequentie ω_0). De afstandsvektoren van de elektronen tot hun kern zijn resp. $\vec{r}_1$ en $\vec{r}_2$. Beide kernen zijn gefixeerd op een onderlinge afstand R (langs de z-as bijvoorbeeld), en vormen een twee-atomig molekuul (b.v. H_2).



Als we de atomen opvatten als dipolen met dipoolmomenten $\vec{\mu}_1 = e\vec{r}_1$ en $\vec{\mu}_2 = e\vec{r}_2$, dan kunnen we de wisselwerking tussen de atomen beschrijven als die tussen twee dipolen. De potentiële energie van een dipool met dipoolmoment $\vec{\mu}_1$ in het veld $\vec{E}_2$ van een andere dipool is gelijk aan $-\vec{\mu}_1\vec{E}_2$. Het veld van een dipool met dipoolmoment $\vec{\mu}_2$ wordt gegeven door

$$\vec{E}_2 = -\frac{\vec{\mu}_2}{R^3} + 3\,\frac{\vec{R}\cdot\vec{\mu}_2}{R^5}\,\vec{R}\ ,$$

waarbij R de afstand tot die dipool is.

a) Schrijf de volledige Lagrangiaan op voor dit systeem.

b) Voer de volgende transformatie uit:

$$\vec{q}_1 = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{\sqrt{2}}\ ,$$

$$\vec{q}_2 = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}}\ ,$$

en bereken de met $\vec{q}_1$ en $\vec{q}_2$ toegevoegde impulsen $\vec{p}_1$ en $\vec{p}_2$.

c) Geef de Hamiltoniaan $H(\vec{p}_1,\vec{p}_2,\vec{q}_1,\vec{q}_2)$ en de Maxwell-Boltzmann verdeling voor N van deze twee-atomige molekulen.

d) Reken de toestandssom en de vrije energie uit. Bepaal vervolgens de gemiddelde energie per molekuul en de soortelijke warmte C_v per molekuul.
Reken de gemiddelde kracht uit tussen twee atomen van een molekuul. Met welke macht van R gaat deze kracht? Is zij aantrekkend of afstotend? Deze kracht is de Van der Waals kracht.

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-75

18. Een grammolecuul van een twee-atomig ideaal gas (temperatuur 18°C) zet adiabetisch uit tot 1,35 maal zijn oorspronkelijke volume. Wat is de eindtemperatuur en de door het gas verrichte arbeid? (R = 2,0 cal/graad, 1 cal = $4{,}2.10^7$ erg).

19. Een grammolecuul van een ideaal een-atomig gas verricht een Carnot-cyklus tussen de temperaturen 400°K en 300°K. Bij de isothermische toestandsverandering bij de hoogste temperatuur is het beginvolume 1 liter en het eindvolume 5 liter. Bereken de hoeveelheid arbeid verricht gedurende een cyklus, en de hoeveelheden warmte die door de twee warmtereservoirs gedurende een cyklus worden opgenomen resp. afgestaan.

20. Bereken het minimale vermogen dat een koelkast verbruikt, indien de inwendige temperatuur - 3°C is, die van de omgeving 27°C, en indien er een hoeveelheid warmte van 5 kcal per minuut naar binnen lekt. (1 cal = 4 Joule).

21. Een grammolecuul van een twee-atomig ideaal gas ondergaat een toestandsverandering, welke in het (p,V)-diagram door een recht lijnstuk wordt beschreven. In de begin- en eindtoestand zijn de temperaturen resp. T_1 en T_2 en de volumina resp. V_1 en V_2. Bereken de door dit systeem verrichte arbeid en geabsorbeerde warmte, uitgedrukt in T_i, V_i (i = 1,2) en R.

22. Beschouw het systeem van opgave 6, waarbij echter de keten van massa's en veren wordt uitgebreid tot n massa's en n + 1 veren. Bepaal weer voor kleine trillingen de eigenfrequenties van dit systeem, en geef de verdeling van die eigenfrequenties in de limiet $n\to\infty$. Doe dit op twee manieren:

(vervolg opg. 22)

I. (Via constructie van de eigenvectoren).
Probeer als uitwijking van het j-de deeltje:

$u_j(t) = a_j \, e^{i\omega t}$.

Vind m.b.v. de bewegingsvergelijking een verband tussen a_j , a_{j+1} , a_{j+2} , etc.

Substitueer $a_j = \lambda^j$,

en bepaal hieruit en uit de randvoorwaarden dat de muren vast zijn, ω en λ .

Controleer of het aantal vrijheidsgraden gelijk is aan het aantal zo gevonden eigentrillingswijzen. Is het gevonden stelsel lineair onafhankelijk? Volledig? Verifieer de (gegeneraliseerde) orthogonaliteitsrelaties.

II. (Via de eigenwaardevergelijking $\det(V-\omega^2 T) = 0$).
Noem deze determinant f_n . Vind een relatie tussen f_{n+1} , f_n en f_{n-1}. Herleid deze, door geschikte keuze van parameters γ en x, tot de volgende recursierelatie voor de grootheden $g_n = \gamma^n . f_n$

$$g_{n+1} - 2\,x\,g_n + g_{n-1} = 0. \qquad (1)$$

Laat zien dat hieraan voldoen de Tchebitchef polynomen $T_n(x)$, maar ook de verwante polynomen $S_n(x)$, gedefinieerd door

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$$

$$\sqrt{1-x^2}\; S_n(x) = \sin(n \arccos x),$$

en dat de meest algemene oplossing van (1) geschreven kan worden als

$$g_n(x) = a(x)\, T_n(x) + b(x)\, S_n(x)$$

voor zekere $a(x)$ en $b(x)$. Bepaal $a(x)$ en $b(x)$ uit de beginvoorwaarden $g_1(x) = \ldots$ en $g_2(x) = \ldots$

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-75

17. (Vervolg). Ter vermijding van misverstanden in verband met vraagstuk 17, i.h.b. gedeelte d), nog de volgende opmerkingen:

1e) Bij molekuulvorming (bijv. H_2) spelen Van der Waalskrachten een te verwaarlozen rol. (Welke zijn wel belangrijk?)

2e) Het aangegeven model is wèl goed bruikbaar om de Van der Waalskracht uit te rekenen tussen twee deeltjes die (in chemische zin) niet tot één molekuul behoren (Bijv. tussen twee A atomen, of twee N_2-molekulen).

3e) In dit vraagstuk worden, uitsluitend met het oog op de berekening, de twee wisselwerkende atomen even als één "molekuul" opgevat.

23. Beschouw, van het systeem van vraagstuk 22 een groot aantal, onderling niet wisselwerkende replica's die in evenwicht zijn met een warmtebad bij temperatuur T.

a) Bereken de soortelijke warmte per systeem.

b) Bereken hieruit, in de limiet $n \to \infty$ de soortelijke warmte per deeltje.

c) Vergelijk de zo gevonden uitkomsten (wat betreft frequentiespektrum en soortelijke warmte per deeltje) met de aannamen hierover resp. de resultaten hiervoor, in de Debije- en in de Einsteintheorie van de vaste stof in 1 dimensie.

~~24~~. Bereken de soortelijke warmte van het tweedimensionale Debijemodel.

25, Veronderstel dat, in plaats van een dispersierelatie van de vorm $\omega = s|\vec{q}|$ (waarin ω de frequentie, $\vec{q}$ de golfvektor en s een konstante is), welke geldig is voor een vaste stof volgens het model van Debije, er een dispersierelatie geldt van de vorm:

$$\omega = c|\vec{q}|^n$$

waarin c en n konstanten zijn.

Bereken het gedrag, bij lage temperatuur, van de soortelijke warmte van een vaste stof met zulk een dispersierelatie.

26. De energie van een tweedimensionale harmonische oscillator, als funktie van twee kwantumgetallen n_1 en n_2, wordt gegeven door:

$$\varepsilon_{n_1,n_2} = h\omega_1 (n_1 + \tfrac{1}{2}) + h\omega_2 (n_2 + \tfrac{1}{2})$$

$$n_1, n_2 = 0, 1, 2, \ldots$$

a) Bereken de kwantummechanische toestandssom.

b) Bereken, voor een groot aantal identieke exemplaren van deze oscillator, zonder onderlinge wisselwerking maar in evenwicht met een warmtebad bij temperatuur T, de volgende grootheden:

1) De vrije en de gemiddelde energie per oscillator.

2) De soortelijke warmte per oscillator.

c) Veronderstel nu dat $\omega_1 \ll \omega_2$, en teken c als funktie van T. Vergelijk dit met het klassieke resultaat. Wat betekent dit voor het equipartitietheorema?

d) Bereken de toestandssom voor de isotrope oscillator ($\omega_1 = \omega_2$):

1e) door in het resultaat van a) $\omega_1 = \omega_2$ te nemen;

2e) uit het energiespektrum, door expliciet de ontaardingsgraad van elk energieniveau in rekening te brengen.

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-75

27. Beschouw een atoom in de grondtoestand, met spin $\frac{3}{2}$.
Laat hierop een magnetisch veld B langs de z-as werken. (Zwak genoeg, zodat hoger aangeslagen toestanden van het atoom buiten beschouwing gelaten kunnen worden).

a) Bereken de kwantummechanische toestandssom.

b) Bereken, voor een groot aantal identieke exemplaren van dit systeem, zonder onderlinge wisselwerking maar in evenwicht met een warmtebad met temperatuur T (alles per atoom):

1e) Het gemiddelde magnetische moment langs de z-as, m_z.

2e) De inwendige energie u.

3e) De soortelijke warmte c.

4e) De entropie s.

c) Schets het verloop van deze vier grootheden als funktie van T. Leid asymptotische uitdrukkingen af, geldig in de limietgevallen $T \to o$ en $T \to \infty$, en ga na of deze resultaten ook op andere gronden te verwachten zouden zijn.

28. (Thermo)

a) Bewijs dat de chemische potentiaal $\mu = \frac{G}{N}$ gegeven wordt door

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}$$

b) Bereken voor een ideaal gas μ als funktie van p en T.

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-75

29. De toestandvergelijking van Van der Waals, welke bij benadering geldt voor een klassiek niet-ideaal gas wordt meestal als volgt geschreven:

$$(p + \frac{a}{V^2})\ (V-b) = RT$$

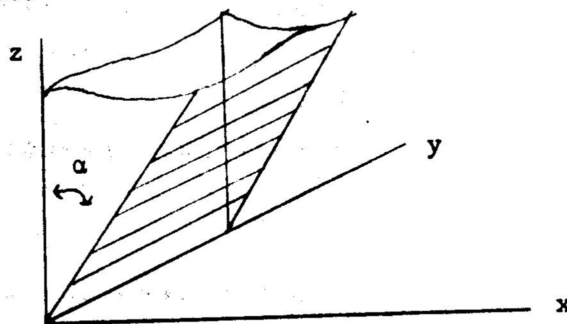
(Deze formule geldt voor 1 grammolekuul van het gas).
Hierin zijn p de druk, V het volume, R de gaskonstante ($= N_A k$, k = konstante van Boltzmann, N_A = getal van Avogadro), T de temperatuur, en a en b konstanten die karakteristiek zijn voor het beschouwde soort gasmolekulen.
Schrijf deze formule in de vorm van de zgn. "viriaalreeks" (dwz. reeks-ontwikkeling van p in machten van ρ , het aantal deeltjes per volume-eenheid in het systeem) en bereken de eerste drie viriaalkoefficiënten.

30. We bekijken een (klassiek) ideaal gas (N molekulen) in een zwaarte-krachtveld gegeven door V(x,y,z) = m g z. Het gas bevindt zich in een oneindig hoge ruif, gegeven door

$0 < x < z \operatorname{tg} \alpha$

$0 < y < b$

$0 < z$



a) Geef de Maxwell-Boltzmann verdeling.
b) Bereken hiermee de (plaatsafhankelijke) druk p(z).
c) Bereken het (moment van het) koppel dat werkt op het gearceerde vlak.
d) Bereken de toestandsintegraal.
e) Bepaal de vrije en gemiddelde energie per deeltje, en de soortelijke warmte bij konstant volume c_V.
f) Bereken wederom het (moment van het) koppel dat werkt op het gearceerde vlak, maar nu uit het resultaat van d).

31\. Bewijs, voor een kanoniek ensemble, van een systeem van N deeltjes met hamiltoniaan $H_N(\{a_i\})$, dat

$$\langle A_i \rangle = -\frac{\partial F_N}{\partial a_i}$$

$$U \equiv \langle H_N \rangle = \frac{\partial \beta F_N}{\partial \beta}$$

$$\langle (\Delta H_N)^2 \rangle = kT^2 C_v$$

$$\langle \Delta H_N \Delta A_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F_N}{\partial a_i \partial \beta}$$

$$\langle \Delta A_i \Delta A_j \rangle = \frac{1}{\beta} \left[\langle \frac{\partial^2 H_N}{\partial a_i \partial a_j} \rangle - \frac{\partial^2 F_N}{\partial a_i \partial a_j} \right]$$

(Hierin is $A_i = \frac{\partial H_N}{\partial a_i}$, $\Delta H = H - \langle H \rangle$, $\Delta A_i = A_i - \langle A_i \rangle$.

De grootheid A_i is de zgn. "inwendige parameter" behorende bij de "uitwendige parameter" a_i .

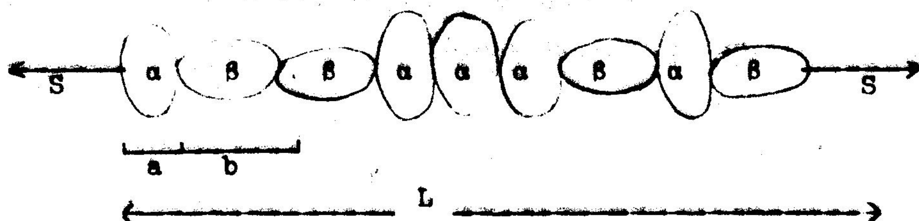
A_i en a_i vormen samen "een parameterkoppel").

Merk op dat $\frac{\partial}{\partial a_i} \langle H_N \rangle \neq \langle \frac{\partial}{\partial a_i} H_N \rangle$.

Bereken alle bovenstaande grootheden voor het systeem beschouwd in vraagstuk 30. Beschouw hierbij als uitwendige parameters : α , b , g .

Wat stellen de bijbehorende inwendige parameters voor fysische grootheden voor?

32 . In een keten van N molekulen kan elk molekuul zich op twee manieren oriënteren: Als het in de toestand α is, heeft het een lengte a en een energie E_α ; als het in de toestand β is, heeft het een lengte b en een energie E_β. Op de uiteinden van de keten werkt een spanning S. De lengte L van de keten is gelijk aan de som van de lengtes van de samenstellende molekulen. Leid een relatie af tussen S en de gemiddelde waarde van L bij een temperatuur T.



Bereken de relatieve fluctuatie van L: $\frac{\langle (\Delta L)^2 \rangle^{\frac{1}{2}}}{\langle L \rangle}$
in de limiet $N \to \infty$.

33. Beschouw een systeem met drie energieniveaux 0 , ε en 2ε waarvan het middelste tweevoudig ontaard is en de andere twee niet ontaard. Bereken de soortelijke warmte van dit systeem.

34. Klassificeer de volgende deeltjes (fermionen, bosonen).
α-deeltjes; ^{3}He ; ^{4}He ; H ; H_2 ; e^+(positon);
$^6Li^+$-ion ; $^7Li^+$-ion .

35. Gegeven: 3 onafhankelijke deeltjes in 3 1-deeltjes-toestanden. Verwaarloos de energieverschillen tussen die toestanden. Bereken de kans, in de drie statistieken, op de volgende mogelijke gebeurtenissen.
a) De drie deeltjes zitten alle in dezelfde toestand;
b) Twee zitten in eenzelfde toestand, één in een andere;
c) Elke toestand is bezet.
Welke statistiek zoudt u het gezelligst noemen, en welke het ongezelligst?

36. Bereken hoe het aantal bosonen in de grondtoestand, van een ideaal Bose-Einsteingas met een temperatuur beneden de kondensatietemperatuur, van de temperatuur afhangt.

37. Bewijs dat een twee- en een eendimensionaal gas van niet-wisselwerkende Bose-deeltjes geen Bose-Einsteinkondensatie vertoont.

38. Bereken de struktuurfunktie $\omega(E) = \int \delta(H_N - E) d\Gamma$ van een klassiek ideaal gas van N deeltjes (zonder invendige vrijheidsgraden) in een volume V.
(Bereken eerst de kanonieke partitiefunktie voor dit systeem, en maak gebruik van het algemene verband tussen de struktuurfunktie en de kanonieke partitiefunktie).

39. Beschouw een systeem van N onafhankelijke quantummechanische rotators met Boltzmannstatistiek. Het traagheidsmoment van elk deeltje is I.

$$\varepsilon_\ell = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \text{ , ontaarding } g(l) = 2l+1 \text{ .}$$

Voer in $\theta = \dfrac{\hbar^2}{2Ik}$.

Bereken de toestandssom voor

a) $T \ll \theta$

b) $T \gg \theta$

Bereken in beide gevallen de soortelijke warmte $C(T)$.

40. Maak opgave 39 nogmaals maar nu voor zowel Fermi- als Bose-statistiek, en met $N=2$. (Gebruik niet het grand ensemble).
Bereken ook de groot-canonieke toestandssommen, van beide statistieken en bepaal ook daaruit weer het vorige resultaat voor $N=2$.

41. Twee volumina I en II bevatten samen N deeltjes en zijn in thermisch kontakt met een warmtebad van temperatuur T. Er bestaat een of ander mechanisme waardoor de twee volumina deeltjes kunnen uitwisselen: $N = N_I + N_{II}$ = constant.
Wat is de voorwaarde voor de meest waarschijnlijke verdeling?
Wat is de waarschijnlijkheid dat N_I deeltjes in I en N_{II} deeltjes in II zitten, voor het geval van een ideaal gas?

42. De Ising keten.
We beschouwen een keten van N vastgeprikte spins. Iedere spin, gekarakteriseerd door de variabele s_i , kan de waarden $s_i = +1$ (spin up) en $s_i = -1$ (spin down) aannemen. $(i = 1,2,\ldots,N)$. De energie van een configuratie $\{s_i\}$ wordt gegeven door

$$E_{\{s_i\}} = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i \, s_{i+1} \, .$$

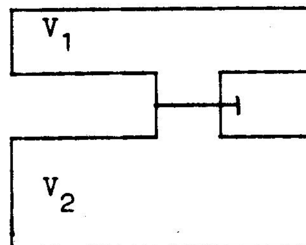
De toestandssom is gelijk aan

$$Z_N = \sum \exp \left\{ \beta J \sum_{i=1}^{N-1} s_i \, s_{i+1} \right\}$$

waarbij gesommeerd wordt over alle configuraties $\{s_i\}$.
Bereken de toestandssom, de gemiddelde energie en de soortelijke warmte.

Instituut voor Theoretische Fysica
der Rijksuniversiteit Utrecht

43. Beschouw twee volumina V_1 en V_2 , die verbonden zijn door een buis. Het geheel bevat N onafhankelijke deeltjes. Tussen V_1 en V_2 heerst een potentiaalverschil zodanig dat de potentiële energie van een deeltje in V_2 gelijk is aan nul, en de potentiële energie van een deeltje in V_1 gelijk is aan W. Het geheel bevindt zich in evenwicht.



a. Bereken de toestandssom, de vrije energie en de chemische potentiaal van dit systeem.

b. Bereken de druk in V_1 en de druk in V_2. In hoeverre geldt de wet van Boyle-Gay-Lussac?

c. Bereken de gemiddelde aantallen deeltjes N_1 en N_2 in resp. V_1 en V_2.

d. We sluiten de verbinding tussen V_1 en V_2. Bereken de chemische potentialen μ_1 en μ_2 in V_1 en V_2 en laat zien dat $\mu_1 + W = \mu_2$.

44. We hebben N deeltjes verdeeld over M roosterpunten (M>N). Ieder deeltje moet zich in een roosterpunt bevinden, en ieder roosterpunt kan maximaal één deeltje bevatten. De toestandssom voor dit systeem is

$$Z_N(M) = K_N . W$$

waarbij W het aantal mogelijke manieren is waarop N deeltjes M roosterpunten kunnen bezetten. (Merk op, dat de waarschijnlijkheid voor iedere bezetting even groot genomen is).

a. Bereken W.

b. Bereken de vrije energie $F_N(M,\beta)$.

c. Neem N en M zeer groot (M>N). Bereken nu K_N door te eisen dat de vrije energie een extensieve (= additieve) grootheid is.

d. Bepaal nu de chemische potentiaal μ.

e. We identificeren M met het volume. Bereken de druk.

f. Bereken nu de Gibbs-potentiaal G(N,p,T) en verifieer $G = \mu N$.

g. Bereken de entropie en verifieer $S = k \log W$.

45. Op het kollege is de grand-potentiaal berekend voor het quantummechanische systeem van niet wisselwerkende deeltjes (zonder spin) met Maxwell-Boltzmann statistiek:

$$q(\alpha,\beta,V) = e^{\alpha} \sum_{\nu} e^{-\beta\varepsilon_{\nu}}$$

waarbij gesommeerd wordt over alle energiewaarden van één deeltje, ε_{ν} .
Wij willen deze uitdrukking nu schrijven

$$q(\alpha,\beta,V) = \int_{0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon} D(\varepsilon) d\varepsilon$$

welke uitdrukking moet gelden in de limiet dat het volume V naar oneindig gaat.
Bereken de toestandsdichtheid $D(\varepsilon)$. Wat is $D(\varepsilon)$ voor deeltjes met spin s ?
Leid ook de overeenkomstige uitdrukkingen af voor $q(\alpha,\beta,V)$ in het geval van Bose- en van Fermistatistiek.

46. Beschouw N deeltjes. Ieder deeltje kan òf harmonisch gebonden zijn (met frequentie ω en een extra bindingsenergie $-\chi$) of zich vrij bewegen in een volume V.
We hebben dus een systeem van een (veranderlijk) aantal driedimensionale harmonische oscillatoren met frequentie ω en een veranderlijk aantal vrije deeltjes. De som van het aantal vrije deeltjes en het aantal oscillatoren is gelijk aan N. Het geheel is in evenwicht.

a. Bereken de kanonieke toestandssom $Z_N(\beta,V)$. Welke evenredigheidsfaktor moet u toevoegen teneinde ~~de~~ van vrije energie een extensieve grootheid te maken.
b. Bereken de groot-kanonieke toestandssom en de grand-potentiaal.
c. We beschouwen dit systeem als een model voor een damp en een vaste stof in evenwicht. De damp wordt beschreven als een ideaal gas, de vaste stof wordt beschreven als een aantal identieke drie-dimensionale harmonische oscillatoren zonder wisselwerking.
(Einstein model). Bereken het gemiddeld aantal deeltjes in de damp $\langle N_D\rangle$ en in de vaste stof $\langle N_V\rangle$, bij gegeven temperatuur en chemische potentiaal.
d. Schets $\langle N_D\rangle/\langle N_V\rangle$ als funktie van $\beta = \frac{1}{kT}$. Wat is het gedrag voor $T\to 0$?
Wat is het gedrag voor $T\to\infty$? Kunt u een verklaring geven voor dit merkwaardige resultaat?

(vervolg opgave 46)

e. Bereken de druk voor een vast totaal aantal deeltjes $<N_D> + <N_V>$ als funktie van T.

47. Beschouw het systeem van opgave 46 en bereken hiervoor de quantummechanische grand-potentiaal. Neem de deeltjes onderscheidbaar. De bindingsenergie van de deeltjes in de vaste stof is groter dan de nulpuntsenergie (per deeltje):

$$\chi > \frac{3}{2} \hbar \omega$$

Los weer de onderdelen c., d. en e. op.

48. Beschouw een systeem van niet-wisselwerkende deeltjes waarin het maximaal toegestane aantal deeltjes per energie-niveau gelijk is aan d. De deeltjes zijn ononderscheidbaar.
Bereken de grand-potentiaal voor dit systeem en de gemiddelde bezetting van de niveaus. Kontroleer de uitkomsten voor d = 1 en d = ∞.
Opm. Deze statistiek die niet in de natuur voorkomt (afgezien van d = 1 en d = ∞) wordt wel "intermediaire statistiek genoemd.

49. De definitie van de ζ-funktie van Riemann is:

$$\zeta(s) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^s} \ (\text{Re } s > 1).$$

We geven:

$$\zeta(\tfrac{5}{2}) = 1{,}342$$

$$\zeta(\tfrac{3}{2}) = 2{,}612 \ .$$

Bovendien is

$$\Gamma(\tfrac{1}{2}) = \sqrt{\pi} = 1{,}772 \ .$$

Verder definieert men:

$$g_s(\alpha) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{l\alpha}}{l^s} \ .$$

Bewijs met het bovenstaande de eerste drie termen uit de volgende asymptotische ontwikkeling:

$$g_{5/2}(\alpha) = 2{,}363\ (-\alpha)^{3/2} + 1{,}342 + 2{,}612.\alpha - 0{,}730.\alpha^2 + (\alpha^2)$$

50. Beschouw een ideaal Bose-gas. Bewijs dat in het overgangspunt T_c de afgeleide van C_v naar T een sprong maakt die wordt gegeven door

$$\left(\frac{\partial}{\partial T}\frac{C_v}{Nk}\right)_{T\downarrow T_c} - \left(\frac{\partial}{\partial T}\frac{C_v}{Nk}\right)_{T\uparrow T_c} = \frac{3,66}{T_c}$$

51. Voor een kristal bestaande uit N atomen, elk met z elektronen, kan men definiëren:

k_F = de straal van de Fermibol (in de theorie van de vrije elektronen)

q_D = de maximale waarde van het golfgetal van het trillingsspektrum (in de theorie van Debije voor de kristaltrillingen. Longitudinale en transversale voortplantingsmethoden gelijk genomen).

Vind het verband tussen k_F en q_D , uitgedrukt in z.

52. (Het kwadratische Stark effekt)
Beschouw een halter (zie opgave 1) bestaande uit twee gelijke massapunten m, op onderlinge afstand a, met ladingen +e en -e , in een elektrisch veld F_z in de z-richting.
(Traagheidsmoment $I = \frac{1}{2}ma^2$, elektrisch dipoolmoment $p = ae$). De halter is vrij draaibaar maar vastgeprikt in zijn zwaartepunt.
Bij een quantummechanische behandeling van dit systeem vindt men, in 2e orde storingsrekening, de volgende uitdrukking voor de gestoorde energieën van dit systeem:

$$E_{jm} = \frac{j(j+1)\hbar^2}{2I} + \frac{1}{2} b_{jm} F_z^2 + O(F_z^4)$$

waarin de quantumgetallen j en m beide geheel zijn, en voldoen aan

$$j \geqslant 0 \ , \ -j \leqslant m \leqslant j \ .$$

De coefficiënten b_{jm} kunnen ook berekend worden, en zij blijken te voldoen aan

$$\sum_{m=-j}^{j} b_{jm} = 0 \text{ als } j \neq 0$$

terwijl b_{oo} gegeven is door

$$b_{oo} = \frac{2Ip^2}{3\hbar^2} \ .$$

Beschouw nu een systeem van N van zulke halters, zonder onderlinge wisselwerking, met M.B. statistiek. Bereken in dezelfde benadering (dus tot in 2e orde in F_z) de gemiddelde waarde $\langle P_z \rangle$ van de z-component van het totale elektrische dipoolmoment $\vec{P}$, en hieruit de elektrische susceptibiliteit χ_{zz}

(vervolg opgave 52)

$$\chi_{zz} = \left(\frac{\partial \langle P_z \rangle}{\partial F_z}\right)_{\vec{F}=0}$$

Geef ook alle andere componenten van de tensor χ.

Schets het verloop van $\chi_{zz}(T)$ als funktie van T. Beschouw in het bijzonder de limieten $T \to 0$ en $T \to \infty$ en geef in deze limieten benaderingsformules voor χ_{zz}.

Bereken de soortelijke warmte in 2e orde in F_z.

53. Beschouw het volgende model voor een systeem van polymeren. Een polymeer ter grootte n bestaat uit n atomen A met massa μ. Een polymeer bestaande uit n atomen heeft een bindingsenergie χ_n. De polymeren bewegen verder als vrije deeltjes met massa $m_n = n.\mu$ door het volume V.

a) Als er N_A atomen A zijn, bewijs dan dat het aantal mogelijkheden om deze in N_1 polymeren ter lengte 1, N_2 polymeren ter lengte 2,..., N_n polymeren ter lengte n,... te verdelen gelijk is aan

$$\frac{N_A!}{\prod_{n=1}^{\infty} N_n! \, . \, \prod_{n=1}^{\infty} (n!)^{N_n}} \; .$$

Merk op, dat

$$\sum_{n=1}^{\infty} n.N_n = N_A \; .$$

b) Bewijs dat de kanonieke toestandssom gelijk is aan

$$Z_{N_A}^{kan} = \sum{}' \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{N_n!} \left\{\frac{V}{n!h^3} \left(\frac{2\pi n\mu}{\beta}\right)^{3/2} e^{\beta\chi_n}\right\}^{N_n} ,$$

waarbij de som gaat over alle verdelingen $\{N_n\}$ met

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n.n = N_A .$$

c) Bereken de groot-kanonieke toestandssom en leid hieruit af de druk en het gemiddelde aantal atomen A bij een chemische potentiaal μ_A.

d) Wat is het gemiddelde aantal polymeren $\langle N_n \rangle$ met grootte n? Bereken ook de gemiddelde fluctuatie in dit aantal.

e) Wat is het gemiddelde totale aantal polymeren

$$\bar{N} = \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right\rangle \quad ?$$

f) Bewijs, dat $\frac{PV}{kT} = \bar{N}$. Had u dit ook verwacht?

g) Wat is de gemiddelde grootte van de polymeren?

Merk op dat dit model ook gebruikt kan worden als ruwe benadering voor een damp. De polymeren ter grootte n corresponderen dan met een druppel bestaande uit n atomen.

54. Vrije elektronen bezitten een permanent magnetisch moment gelijk aan

$$\vec{\mu} = 2\mu_B \cdot \vec{S}$$

waarin μ_B (= 1 Bohrmagneton) $= \frac{e\hbar}{2mc} \approx 10^{-20}$ erg/gauss, $\vec{S}$ = de spin van het elektron. In een uitwendig magnetisch veld worden de magnetische momenten gericht; de bijdrage van de spin van de vrije elektronen geeft het Pauli-spin paramagnetisme.

Laat B een homogeen uitwendig magneetveld in de z-richting zijn. De spintoestand van het elektron kan beschreven worden door de z-komponent S_z. Het magneetveld geeft een energieverschuiving

$$\Delta\epsilon = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -2\mu_B B S_z = \mp \mu_B B,$$

korresponderende met de spintoestanden $S_z = \pm \frac{1}{2}$. De energieniveaux van een vrij elektron met spin zijn

$$\epsilon_{\vec{k}\,\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mp \mu_B B .$$

Hierbij is de wisselwerking tussen het magnetisch veld en de baanbeweging verwaarloosd.(Deze wisselwerking geeft aanleiding tot het Landau-diamagnetisme).

a. Bewijs dat de magnetische susceptibiliteit van N vrije elektronen in een volume V voor zwakke magneetvelden gegeven wordt door

$$\chi = 2\mu_B^2 \int d\epsilon\, D'(\epsilon)\, \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}$$

$D(\epsilon)$ is de ééndeeltjes-niveaudichtheid van een gas van vrije fermionen zonder spin.

b. Geef een benaderingsformule van χ geldig voor hoge temperaturen.

c. Bereken χ voor $T = 0$, en vind bovendien de eerste korrektieterm. (Maak daartoe gebruik van de formule van Sommerfeld. Zie bijv. ter Haar, p. 132 of Becker, 2e druk, p. 171.)

55. Geef numerieke schattingen voor de fermi-energie van

a. elektronen in een metaal

b. nucleonen in een zware kern

c. ^{3}He-atomen in vloeibaar ^{3}He (volume per atoom: 46,2 Å^3).

Bereken de overeenkomstige grootheid voor ^{4}He.

Breng deze in verband met fysische grootheden.

56. Bewijs dat een ideaal Fermigas voldoet aan de betrekking

$$pV = \frac{2}{3} U$$

waarin U de inwendige energie van het gas is. Hoe groot is U bij het absolute nulpunt?

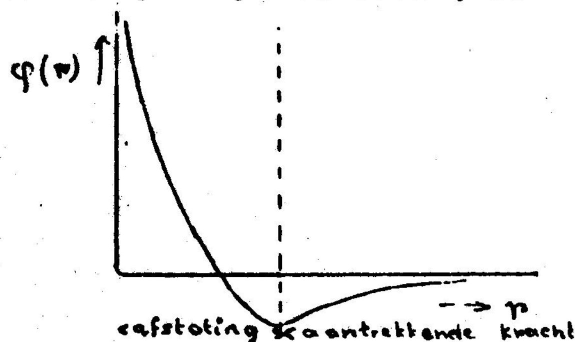
Werkcollege Statistische Mechanica 1974-75.

57. (Viriaaltheorema niet-ideaal gas). Hetzelfde systeem als in opgave 10 , behalve dat nu de (puntvormig of bolvormig gedachte) deeltjes wèl krachten op elkaar uitoefenen. Potentiële energie van de wisselwerking

$$\sum_{1\leq i<j\leq n} \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \, .$$

Hierin zijn $\vec{r}_1 - \vec{r}_N$ de coordinaten van de middelpunten van de gasmoleculen, en $\phi(r)$ de "paar-potentiaal", is een gegeven funktie van r.

Voor de meeste gassen ziet $\phi(r)$ er ongeveer zo uit:



A) Splits de totale viriaal V in twee gedeelten $V = V_u + V_i$: V_u t.g.v. de krachten v/d wand en V_i t.g.v. de onderlinge wisselwerking.
Voer in de funktie $g(r_1 , r_2)$ ("paardistributiefunktie") als volgt:

Gegeven twee volume-elementjes $d\vec{r}_1$ en $d\vec{r}_2$ ter plaatse van $\vec{r}_1$ resp. $\vec{r}_2$, dan is de kans dat in beide volume-elementjes zich een (middelpunt van een) gasmolecule bevindt evenredig aan $\rho d\vec{r}_1$ en aan $\rho d\vec{r}_2$ ($\rho = \frac{N}{V}$). De evenredigheidfaktor is $g(\vec{r}_1 , \vec{r}_2)$. Dus: Kans = $\rho^2 g(\vec{r}_1 , \vec{r}_2) d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2$.
Tracht aannemelijk te maken dat g de volgende eigenschappen heeft:

1) Als $\vec{r}_1$ en $\vec{r}_2$ ver van de wand, dan $g(\vec{r}_1 , \vec{r}_2) \to g(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$.
2) Als $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \to \infty$, dan $g(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \to 1$.
3) Als $\phi(r) = 0$ dan $g(\vec{r}_1 , \vec{r}_2) = 1$ (voor alle $\vec{r}_1 , \vec{r}_2$).
4) Als $\rho \to 0$, dan $g(r) \to e^{-\frac{\phi(r)}{kT}}$ (Boltzmannfaktor voor 2 deeltjes) .

B) Druk de gemiddelde inwendige viriaal $\overline{V}_i$ uit in de funkties $\phi(r)$ en $g(r)$, en leid uit het viriaaltheorema af:

$$\frac{P}{kT} = \rho - \frac{\rho^2}{6kT} \int r\phi'(r)g(r)d\vec{r} \qquad (1)$$

C) Bewijs hieruit

$$\frac{P}{kT} = \rho + \frac{\rho^2}{6} \int d\vec{r}\; y(r) \left(r\frac{d}{dr}\, e^{-\frac{\phi(r)}{kT}} \right) \qquad (2)$$

waarin

$$y(r) = e^{\frac{\phi(r)}{kT}}\, g(r)$$

58. (Gas van harde bollen).
Systeem hetzelfde als in opg. 57 behalve dat wij voor $\phi(r)$ de keuze maken:

$$\phi(r) = \phi_{HB}(r) = \begin{cases} +\infty & \text{als } 0 \leq r \leq \sigma \\ 0 & \text{als } r > \sigma \end{cases}$$

waarin σ = diameter v.e. harde bol.

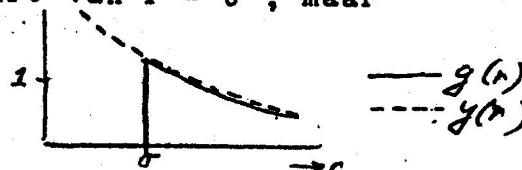
Vervang in gedachte de bollen door massapunten, elk omgeven door een "werkingssfeer" van straal σ .
Geen enkel massapunt mag zich bevinden binnen de werkingssfeer van een ander massapunt.
Noem P_1 de (gemiddelde) druk op de werkingssfeer van een willekeurig gekozen deeltje, uitgeoefend door de andere massapunten.

A) Leid af, uit het viriaaltheorema, dat

$$\frac{P}{kT} = \rho + 4v_o\rho\, \frac{P_1}{kT} \qquad (1)$$

waarin $v_o = \frac{4\pi}{3} (\frac{\sigma}{2})^3$ (eigenvolume v.e. harde bol).

B) Men kan aantonen dat voor harde bollen $g(r)$ een discontinu verloop heeft in de buurt van $r = \sigma$, maar dat $y(r)$ daar continu is:



Dit aannemende, bewijs dan uit (2) van opg. 12 dat voor harde bollen:

$$\frac{P}{kT} = \rho + 4v_o\rho^2 g(\sigma+0) \qquad (2)$$

waarin $g(\sigma+0) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} g(\sigma+\varepsilon)$ ("Limiet van rechts").

Werkkollege Statistische Mechanica 1974-75

C) Uit (1) en (2) zien wij dat

$$\frac{P_1}{kT} = \rho\, g(\sigma+0) \qquad (3)$$

Het rechterlid is de kans per volume-eenheid om een massapunt aan te treffen vlak buiten de werkingssfeer van een gegeven massapunt.
Tracht de relatie (3) ook direkt af te leiden uit wat u weet over de Maxwell-Boltzmann snelheidsverdeling van molekulen.

D) Maak nu de veronderstelling

$$P_1 = P$$

en vind zo, uit (1), de benaderende uitdrukking voor de druk van een harde bollengas:

$$\frac{P}{kT} = \frac{\rho}{1-4v_o\rho} \; .$$

59. Beschouw een systeem van harde bollen met diameter σ in d dimensies ($d = 1, 2, 3$).

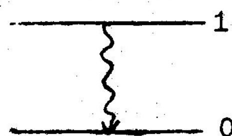
a) Bereken de 2e en 3e viriaalcoefficient (Lastig!).

b) Bereken de funktie $g_1(r)$ welke voorkomt in de dichtheidsontwikkeling van de paardistributiefunktie $g(r)$:

$$g(r) = e^{-\frac{\phi(r)}{kT}} \{1 + \rho\, g_1(r) + \rho^2 g_2(r) + \dots\}$$

c) Bereken uit het resultaat van (b) op twee manieren de tweede viriaalcoëfficiënt . (Gebruik makend van het viriaaltheorema en van de uitdrukking voor de isothermische compressibiliteit).

d) Leid uit het resultaat van (a), via deze laatste zgn. "compressibiliteitsrelatie" een conditie af waaraan de funktie $g_1(r)$ moet voldoen.

60. 

Een atoom met twee niveaux (energieverschil $\varepsilon = \hbar\omega$) bevindt zich in een ruimte met zwarte straling van temperatuur T. De kans per tijdseenheid op absorptie zij $w_{1,0}$, en die op gestimuleerde plus spontane emissie $w_{0,1}$. Neem aan dat geldt

$$w_{0,1}\, e^{-\beta\varepsilon} = w_{1,0}\,.$$

A. Beschouw N_A atomen waarvan N in het aangeslagen niveau. Leid een uitdrukking af voor de overgangswaarschijnlijkheid $W(N'|N)$. Schrijf ter afkorting $w_{0,1} = \lambda$. Hoe luidt nu expliciet de Mastervergelijking voor de waarschijnlijkheid $P(N,t)$ dat N atomen geëxciteerd zijn?

B. Bereken de grootheden

$$A_1(N) = \sum_{N'} (N'-N)\, W(N'|N)$$

$$A_2(N) = \sum_{N'} (N'-N)^2\, W(N'|N)$$

en leid daarmee het rechterlid af van de momentvergelijkingen

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_N N P(N,t) = \frac{\partial \overline{N}}{\partial t} = \ldots$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_N N^2 P(N,t) = \frac{\partial \overline{N^2}}{\partial t} = \ldots$$

C. Los de vergelijking voor het eerste moment op. Bereken de grootte van de fluctuaties

$$\overline{N^2} - \overline{N}^2$$

voor evenwicht en zo mogelijk ook voor niet-evenwicht.